シュウィンガー量子力学

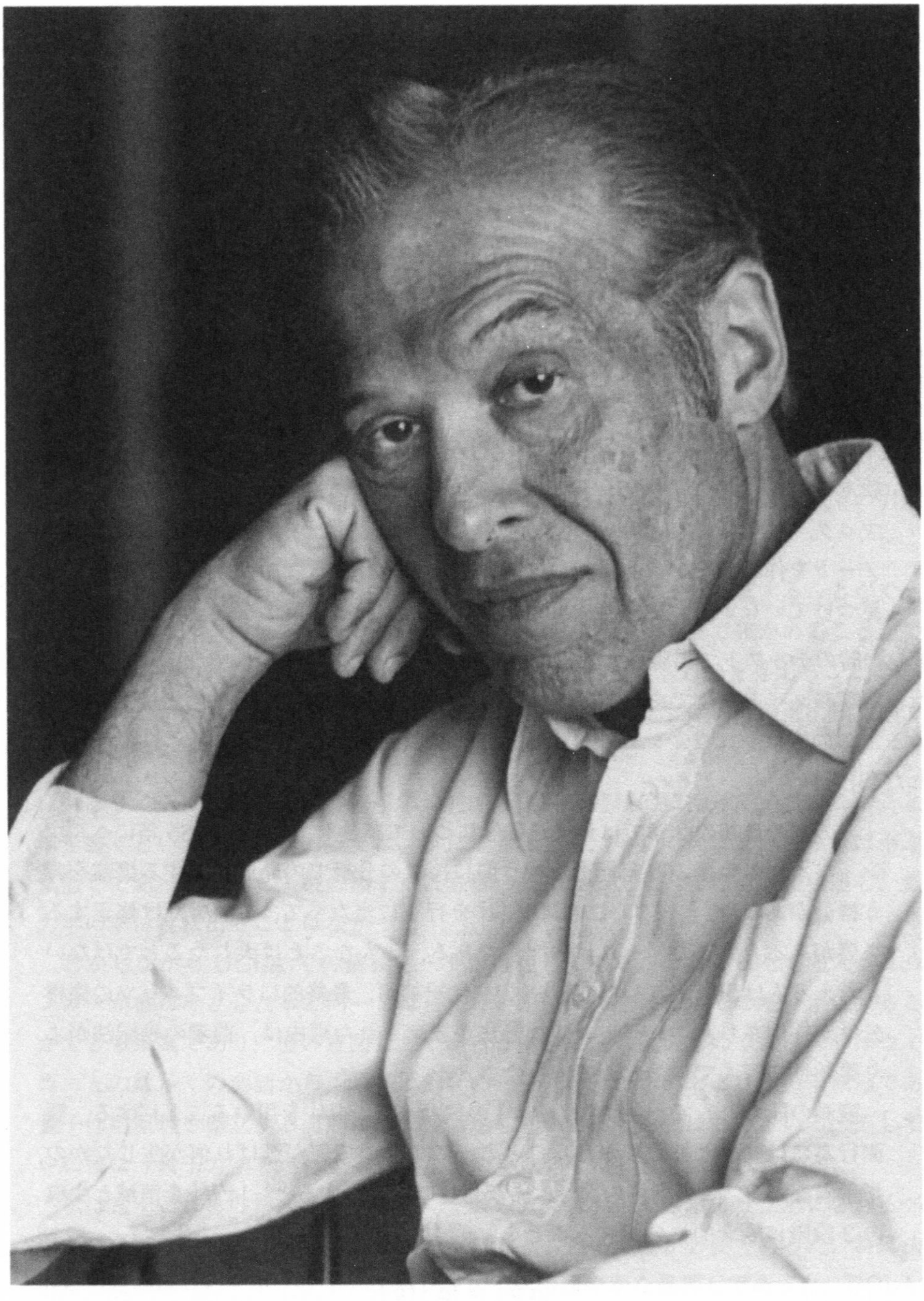
Quantum Mechanics

Symbolism of Atomic Measurements

Julian Schwinger
ジュリアン シュウィンガー
B.-G. エングラート 編　清水清孝・日向裕幸 訳

丸善出版

クラリスとオーラに



Julian SCHWINGER (1918–1994)

はじめに

ジュリアン・シュウィンガーはハーバード大学で定期的に量子力学を講義していた1950年代から，量子力学の教科書を書こうと計画していた*．ロジャー・ニュートンは次のように回想している†．

> 我々のグループ(スタンリ・デゼール，ディック・アルノヴィット，チャック・ツェマック，パウル・マルチンと他に誰がいたかは忘れたが)が彼の量子力学の講義ノートを作成したところ，彼は「量子力学を遂行するための完璧な方法をまだ見つけていない」という理由で出版することを決して望まなかった．

結局，当時のテキストで出版されたものは1955年にレ・ズウーシュでシュウィンガーが行った講義ノートだけであった．これは，ロバート・ケーラー‡の助言と協力に依っている．この本はシュウィンガーによる以下の序文を付け加えて1991年に再度出版された [3]．

> この本の最初の2章では量子運動学について議論している．1985年にヘルマン・ワイルの生誕100年記念を祝う際に，この分野での発展に関する講演を行う機会があった．[⋯]　この講演 [4] を行うに当たって，1箇所だけ修正する必要があると感じた．それは表記法である．こんなことは大したことではないと考える人は思い起こして欲しい．19世紀初頭，最終的にライプニッツの微積分学が採用され，ニュートンの流分法が放棄された理由は，前者の表記法がより柔軟性に富んでいるためであったことを．
>
> 観測の記号として，今後 $M(a',b')$ の代わりに $|a'b'|$ を用いることにする．観測行為には初めと終わりがあることと，この行為で何が選ばれ何が生じたかの指示内容とを，この観測の記号は結び付けている．すると，$|a'b'|$ を消滅と生成の2段階に概念的に分解することを，
>
> $$|a'b'| = |a'\rangle\langle b'|$$

---

*Mehra と Milton による最近の伝記 [1] の 10 章を参照．　†Schweber の著書 [2] の 7.11 において引用．　‡[3] の序論を参照．

> と記号的に表すことができるし，さらに仮説的な空の状態や，記号 Ψ や Φ を必要としなくなる．
>
> 量子動力学に関しては，量子作用原理を実質的に用いて物理の問題を解く例題をこれらの章に多く含めなかったことを，長い間残念であると思ってきた．この点はおそらく量子力学の別の本で改善することができるであろう．[…]

この表記法の変更は，シュウィンガーが 1980 年代中ごろにカリフォルニア大学ロサンゼルス校(UCLA)で 2 回教えた通年コース(3 学期分)の量子力学の講義ノートに，系統的に取り込まれた．私は初年度の大半の期間は UCLA にいるという大変な幸運に恵まれ，実のところ，研究室で学生からの質問と問題演習の面倒を見ていたし，そして大学を去った後も彼の手書きの講義ノートをずっと手に入れていた．

実際，これらの講義ノートはシュウィンガーが書こうとした本(それは「量子力学」というごく自然な題と,「原子系観測の記号体系」という彼以外の人にはそれほど意味のはっきりしない副題が付けられた)の土台であった．この副題の名称はプロローグに述べられている彼の哲学を簡潔に宣言したものである．9 ページからの以下の引用文がその点をよく表している．

> 物理学は実験科学であり，ある意味では実験によって立証することができる事柄のみを対象としている．理論の目的は，実験によって確かめることができる結果に対して，統一的見解，法則の体系化と言えるものを与えることである．したがって自然科学の分野の理論において基本的なものはその適用領域内での観測の理論である．

シュウィンガーは最先端の物理学に対する関心を持続的に持っていた．このことが本を書くという大仕事にとっては，常につきまとう，そして後になってみれば不運な気散じであった．そして彼のあまりにも早い死によってすべての計画が中座し，量子力学の本は世に出ることはなかった．

しかしながら UCLA での講義ノートが存在している．これらはもちろんシュウィンガーが書こうとした本と同一とは言えないが，幻の本にとっての唯一手にすることができる草案であり，彼の意図したであろう内容に最も近いものである．シュウィンガーとの数多くの会話から，量子運動学の一般的構造の導出および動力学原理である量子作用原理を確立する道筋に，大変満足していたことを私は知っている．そしてついに彼は「量子力学を遂行する完璧な方法を見つけた」と，私は思う．

私は常々これらの講義ノートを広く一般の人々に利用できるような形にされるべきだと考えてきたが，実際にこれを進めるには友人達の激励が必要であった．特に決定的だったのはロバート・フィンケルシュタインの穏やかな後押しであった．UCLA の教員会館(チャタムは数年前に消えたが)でともに昼食をとっているとき,「誰かが講義ノートを出版しなければ」という私の見解に対して，彼は即座にこう言った.「君しか

いないよ」．ボブ(ロバートの別称)，どうもありがとう．

そしてもちろんシュウィンガー夫人クラリスからも，大変穏やかではあるがはっきりと,「あなた以外には考えられないわ」という変わらぬ支持をいただいた．クラリスさん，ありがとう．

我が愛する妻オーラは，この仕事に取りかかっている間彼女への配慮が薄れがちであったにもかかわらず，この本が私にとってどれほど，そしてなぜ大きな意味を持っているのかを十分承知して，決して不満を漏らすことはなかった．ありがとう，オーラ (Dziękuję Ci Olu)．

UCLA でのシュウィンガーの講義ノートは 3 学期分の講義に対応して，3 部から成り立っている．内容の概略は以下のとおりである．

秋学期の講義内容である A 部は,「量子運動学の一般的な枠組みの自己完結的な物理的および数学的な展開」[4] を成し遂げたシュテルン・ゲルラッハ型の実験の解析から始まっている．そこではかなり技術的な問題も取り上げられている．特にユニタリー変換はいろんな角度から議論され，角運動量の代数は深く論じられている．そしてガリレイ不変性の解析により非相対論的なハミルトン演算子(ハミルトニアン)が導かれている．

冬学期の B 部がそれに続いている．微小な時間変位への応答として運動方程式が確立される．そして量子作用原理が導出され，基本原理として受け入れられる．B 部の残りと C 部は作用原理の多くの教育的な応用例(前述の数多くの例題)から成り立っている．B 部はたとえば(強制)調和振動子，水素様原子の束縛状態の性質，そしてラザフォード散乱の取り扱いを含んでいる．

春学期の講義内容である C 部は，クーロン力の働いている 2 粒子系の問題，およびその同種粒子の場合に必要な修正も含めた議論から始まっている．そして同種多粒子系の扱いが続き，そこでは第 2 量子化の考えから最終的に量子場の概念を導いている．その最初の応用として，多電子原子に対するハートレー・フォックとトーマス・フェルミの取扱いについて述べている．特に後者は詳しく議論されている*．二番目でかつ最後の応用例として，ラム・シフトの(非相対論的な側面の)理解に必要な範囲まで，電磁放射の量子論の議論を展開している．

シュウィンガーは，講義でもそして配布した資料においても，彼自身による非常に多くの高度に独創的な寄与について，それが自分の手柄であるなどとは言わなかった．もちろん他人の業績に関しては必要に応じていつでも言及した．私も本の編集に際して，彼のやり方に従うことにした．

講義に出席している学生に講義ノートを配ることと，不特定多数の読者のために本を書くことはまったく別物である．したがって彼の講義ノートを本の形にする際に多

---

*このことがシュウィンガーにとって教育と研究が密接に関係していたことの例である．この時期，彼はトーマス・フェルミの方法の改良の研究に取りかかっていた．

少の変更は避けがたかった．しかし変更を最小限に留めるよう努力した．1980 年代半ばの UCLA での講義ノートに加えて，第 12 章では彼が 1987 年にアルバカーキーのニューメキシコ大学で行った講義内容もいくつか含まれている．プロローグは 1960 年代初頭に行った公開講義*の録音を書写した原稿を元にしている．演習問題の大半はシュウィンガーが作った．講義ノートに書かれているものの他に，UCLA の研究図書館に保管されているシュウィンガー書簡 [5] の中にも多くの良問を見つけた．実際，私が使った問題の素材はすべてそこに保管されているものである．UCLA の特別収蔵品の学芸員であるシャーロット・ブラウンさんにはシュウィンガーの書簡を探す際に大変お世話になった．彼女に心から感謝する．

ドイツのガルヒンクの量子光学マックス・プランク研究所で，何年にも渡る滞在中に受けた厚遇に対してヘルベルト・ヴァルター氏に感謝したい．この本に取りかかっている間，同研究所の諸設備など非常に助けになった．またこの仕事の最終段階にさしかかった昨年は，ウルム大学から援助を受けた．この量子物理学研究所への寛大な招待に対してウォルフガング・シュライヒ氏に感謝する．

シュプリンガー・フェアラークの編集部，特にヴォルフ・バイグルベック，クリスティアン・キャロンそしてブリジット・ライヒェル-マイヤー氏らの助けは貴重であった．この場を借りて感謝する．最後に手書きの原稿を私が編集できる電子ファイルに変換してくれたイェンス・シュナイダーさんに感謝する．

2000 年 9 月，ドイツのイスマニングにて　　　　B.-G. エングラート

参考文献

1. Jagdish MEHRA and Kimball A. MILTON: *Climbing the Mountain. The Scientific Biography of Julian Schwinger* (Oxford University Press, Oxford and New York 2000)
2. Silvan S. SCHWEBER: *QED and the Men Who Made It: Dyson, Feynman, Schwinger, and Tomonaga* (Princeton University Press, Princeton 1994)
3. Julian SCHWINGER: *Quantum Kinematics and Dynamics* (W.A. Benjamin, New York 1970; reprinted by Addison–Wesley, Redwood City 1991)
4. Julian SCHWINGER: 'Hermann Weyl and Quantum Kinematics'. In: *Exact Sciences and their Philosophical Foundations. Proceedings of the International Hermann Weyl Congress, Kiel, Germany, 1985*, edited by Wolfgang DEPPERT et al. (Verlag Peter Lang, Frankfurt/Main and New York 1988) pp. 107–129
5. Julian Schwinger Papers (Collection 371), Department of Special Collections, University Research Library, University of California, Los Angeles

*[2] の 7.10 でこの講義についてのコメントがある．

訳者まえがき

本書は,「はじめに」にも説明されているようにシュウィンガーの講義ノートを教科書としてまとめたものである．全体で12章から成っており相対論的量子力学を除いた広範な領域についてシュウィンガー独特の導入方法で議論を展開している．

「プロローグ」においては，量子物理学の持つ論理を物理学の歴史を辿りながら展開し，現象の記述に対する彼自身の持つ，いわゆる「量子電磁気学」的な定式化を主張している．ただ，このプロローグが彼自身がこの教科書のために書いたものではなく，彼の講演をまとめたものなので，教科書の序文としては多少違和感があるかもしれない．

第1章は，実験の観測から量子論を構築するという，非常に面白い内容である．彼自身，この方法が量子力学を導入し教えるための，完璧な方法であると考えていたようである．観測量を表現する演算子が非可換であることが本質的であることを，シュテルン・ゲルラッハの実験結果を用いて状態が2次元の場合に示し，それをさらに大きな次元に拡張して，最後に連続極限まで持って行くことで，ハイゼンベルクの交換関係まで到達する議論の展開はとても興味深いものである．

どのような本でも扱っている連続的自由度や角運動量などが，その後に議論されているが，ここでもシュウィンガーの特徴ある捉え方が随所で現れている．

そして第1章と同様にこの本の特徴的な章が，量子作用原理を展開する第5章である．量子力学の運動方程式を作用原理から導出する理論形式が丁寧に説明されている．これはシュウィンガーの量子作用原理と呼ばれており，この本では一貫してこの原理から出発して量子論を扱い，そこが非常にユニークな点である．

これを応用した自由粒子や振動子に関する話が，6章と7章で展開されているが，通常は微分方程式から出発する数学として学ぶ特殊関数が，物理の問題を扱いながらいろいろな角度から自然に導入されており，非常に教育的である．

量子力学を学ぶときの基本である水素原子の問題が8章および9章で取り扱われているが，そこでもいたる所でシュウィンガーの特徴ある捉え方に遭遇する．

ここで気がつくことなのだが，この本では散乱に関する特別な章がない．通常の量

子力学の教科書では散乱問題は散乱断面積の古典的な扱いから量子論での取り扱いについて詳しく議論されていると思われるが，この本では，散乱状態は数学的に束縛状態と同等に扱われ，各章で必要に応じて触れられているだけである．

水素原子に続く話題は，同種粒子と多電子原子そして電磁放射の話である．フェルミ統計とボース統計についても量子作用原理から統一的に説明するところに大きな特徴がある．またトーマス・フェルミ模型で原子の記述をかなり詳しく定量的に行っている．ここでもいかにも数学の知識が豊富なシュウィンガーらしい数学的な取り扱いは読んでいて非常に楽しい．電磁場の導入もこの著者ならではの論理展開がなされ印象深い．

さらに各章の終わりに，多くの演習問題がついている．これらの問題にはシュウィンガー自身が作った問題が多く含まれており，結構難しい問題も多い．また本文中でもこれらの問題の結果を使って議論を進めている場合もあるので時間を見つけて，問題に挑戦してみるとよい．

以上より，この本は大学初年級の量子力学の講義の教科書としてはあまりに難解である．しかし内容は非常に面白く，論理的に量子論が導入されていくので一度量子論を学び終えた大学 4 年の学生や大学院生，さらに量子力学を研究で使ったり教えたりしている方々にとっては多くの意味で興味深い本であると思う．

誤訳，誤字のないように十分留意したつもりであるが，それでもなお誤りはあろうかと思われる．その際は読者のご指摘を頂ければ幸いである．

本書は，英語版が LaTeX を使って書かれているので，それを元に日本語訳を行った．明らかにミスタイプと思われる箇所を訂正した以外は式番号まで含めて原著のままである．

最後に，シュプリンガー・フェアラーク東京の方々に感謝する．

2003 年 5 月　　清水清孝・日向裕幸

目次

プロローグ

理論物理学者が問題の基礎について考える方法，つまり問題にどう取り組むかという態度，そして合理的な解が何であるかを判断する一般的な基準などには，深く哲学的な教訓があると私には思われる．したがって理論物理学者は自ら持っている一般的な世界観，つまり世界像をはっきりと表明することが重要である．

このことは，量子物理学の哲学的内容と関連して特に意義がある．なぜなら量子物理学または量子力学(量子力学は微視的現象，つまり原子的現象を理解する最終的に合理的な体系であると私は考えている)は，物理学者そしてそれゆえ間接的には一般人の思考様式または世界像に対して，物理学の発展の中でおそらく最も大きな衝撃を与えたと思われるからである．

さて，量子物理学の起源というものを特に理解しようと望むなら，いわゆる古典物理学の発展を通して，どのようにその誕生の舞台が設定されていたのかを過去に戻って眺め，それから量子物理学と古典物理学を比較しなければならない．古典物理学とは，すべての現象の精密な定式化であり，20 世紀初頭に遂に本質的には完全な形で表現された．古典物理学は，その基礎をなす概念は理想化されてはいるが(その意味でこれらを発見したガリレオやニュートンのような人になることは容易ではない)，これらの概念が普通の日常的な出来事にまで深く浸透しているということにその特徴がある．古典物理学は非常に一般化された法則として表現されてはいるが，その本質を理解することはそれほど難しいことではない．学校の生徒たちは，いつもそれをなんとかこなしている．しかし量子物理学は別である．量子物理学では，日常とはかけ離れた状況に我々は立たされる．そして量子物理学が歴史的にどのように発展してきたのかを知らないと，真の意味を理解することが困難なほどの高いレベルの抽象化に我々は直面する．

最初の壮大な物理学の理論は，もちろんニュートン(Newton)力学であった．これは遠隔作用で相互作用する質点系についての理論であり，重力の伝統的な理論はこの典型的な例である．この理論を一般的に哲学的な基盤で特徴付けるとすれば，ニュートン物理学あるいはニュートン力学は因果的で決定論的な理論であると言ってよいだ

ろう．

ここで**因果的**であるとは，ある時刻に系の状態(「状態」が正確に何を意味するかは後ほど述べる)が与えられたとき，他の任意の時刻の状態が完全に決定されることを意味する．これを因果律と呼ぶ．因果律とは時間に関する演繹的な推論である．ある時刻に系の状態が与えられれば，別の時刻の状態が一意的に決定されるということである．一方，**決定論的**であるとは，状態を知ることによりすべての起こり得る物理現象を正確に決めることができるということである．

因果的であることと決定論的であることの区別は，量子物理学で現れるかなり異質な状況に直面するまでは，それほど重要であるようには思えないかもしれない．これまでニュートン物理学の枠内で状態を話題にしてきたが，ここで状態とは何であるかを述べておこう．瞬時に伝わる力(重力場は当時はそのように考えられていた)のもとで相互作用している粒子の系の状態を決定することは，よく知られているように，与えられた時刻に粒子がどこにいてどのように動いていたかを正確に確定することに対応する．もっと専門的な言葉で言えば，粒子の位置と運動量を決めることである．もしこれらの値がある瞬間に与えられ，運動している粒子が受ける力の法則，たとえば重力場のような逆2乗則という偉大な法則，が正確にわかっているならば，その物理的状況は完全に決定される．系のいかなる時刻での状態も予言され，さらにニュートン物理学は決定論的理論であるため，状態を知ることですべての物理的に妥当な問題に対する答を完全に得ることができる．

さてニュートン物理学が物理学の歴史の中に埋もれた過去の遺物ではないことを示すには，宇宙計画の成功のニュースを聞くたびにニュートン物理学の勝利が証明されている事実を思い起こせばよいであろう．すなわち，物理学のいかなる一般的理論もそうでなければならないように，ニュートン物理学はその対象としている適用領域においては完全に有効な理論である．もちろんここでの適用領域とは，瞬時に伝わる力の知られた法則のもとで運動している物体に関してであり，したがってこれは地球，月，惑星などの引力で作られた完全によくわかっている力の場の中での人工衛星の運動などを含んでいる．

物理学において新しい理論が導入される理由は，おもには対象とする領域が拡大されたことによっている．場合によっては，対象とするある特定の領域において実験技術が進歩して，従来の理論における精度の水準を越える新しい現象が発見され，理論が不満足だとされることもあるかもしれないが．歴史的発展をたどってみよう．17世紀に導入されたニュートン物理学の考え方は，応用はおもに天文現象であったが，200有余年に渡り着実に進展していった．その間，この法則から正確な結果を得るための技術的な手段は著しく進歩して，惑星の軌道を非常に詳細に追跡するためなどに必要な計算を完全に遂行できるまでになった．しかしながら，19世紀には特に電磁気学の領域において，新しい物理学の分野が登場した．そして19世紀後半において，ついに

我々はニュートン物理学の枠内で考えられるものとはまったく別の本質的に新しい物理理論に到達した．これがマクスウェル(Maxwell)の電磁場の理論である．

これらの理論を大まかに分類する限りでは，電磁場の理論も因果的で決定論的な理論であった．しかしこの理論が際立って異質である理由は，状態の記述に関してであった．ニュートンの理論は点粒子に関するものであり，質点が特定の時刻にどこにいてどのように運動しているかを示すことが，状態を確定することであったことを思い起こそう．これは離散的な記述法である．つまりこの物理系についてのすべてを特徴付けるためには，有限の粒子数と有限個の物理量が必要である．これに対して，場の理論では(ここでは引き続き例として電磁場を思い浮かべてもらえばいい)状態を確定するためには，粒子がどこにいてどのように運動していたかを示す有限個の量ではなく，無限個の量が必要である．ある時間に空間のすべての点で電場はどの方向を，そして磁場がどの方向を向いているかを，少なくとも原理的には確定しなければならない．この理論がなぜ因果的理論かというと，もし状態を知れば，つまりある与えられた時刻に空間のすべての領域での電場と磁場の分布がわかれば，その後の時刻における電場と磁場の分布を予言できるからである．ある時刻の状態が与えられれば，他の時刻での状態は一意的にわかる．それゆえに，この理論は**因果的**理論である．

ではなぜ決定論的な理論であるかというと，状態を知ると，つまり電場と磁場を知ると，電磁場に関するすべての事象に対して完全な答を与えてくれるからである．さてこれで古典物理学の領域について話すのを最後にする訳ではないけれども，古典物理学の領域に属するマクスウェルの理論の成功は今日でも日々立証されていることをここで再び注意しておこう．それにはレーダー，テレビ，そして言うまでもなく至る所にある携帯電話などの無線による通信手段の限りない発展を見ればよい．マクスウェルの電磁気学は物理学の発展における過去の歴史ではなく，その正しさは日常的に確認され続けている．しかし，これがある限られた領域に適用され，その領域が物理学の世界のすべてではないという点が重要なことである．

したがって今のところ我々は２つの非常に異なった種類の物理理論を持っている．それらはともに因果的で決定論的ではあるが，状態の記述を特徴付ける性質が本質的に異なっている．その１つはいわばスペクトルの一方の端にあり，離散的な記述法で，有限個の量で記述される．もう１つはスペクトルの他端にあり，連続的な記述法であり，全空間に広がる場で記述されている．これらは古典的な振る舞いの２つの極限，つまり離散的記述法と連続的記述法である．そしてこれらのまったく異なる古典的な記述方法が，量子物理学のさらなる発展の中で，ある意味でどのように統一されたか，さらに的確な表現を用いれば，どのように超越されたかを眺めることはとりわけ興味深い．

もう少し歴史的な発展をたどってみよう．よく知られているように，20世紀の初頭にアインシュタインの名で知られる非常に重要な発見，つまり特殊および一般相対性理論の発見があったことを思い起こそう．しかしこれらはある意味で量子物理学ほど

根本的に新しい進展ではなく，むしろ古典物理学の理論の枠組みを完成させたものであった．それは場の現象，特に電磁場の現象を粒子の理論と同一の基盤の上に置くとすると，厳密なニュートン的な見方に修正が必要であるという認識を表している．この理論の枠組みの中でも粒子を扱っているが，粒子間に働く力はもはや瞬時に伝わる力ではない．粒子間の相互作用が場の媒介によって伝播することは，相対性理論によって特に強調され，いまや正しいものとして認められている．ここで 2 つの古典的な記述様式における差違についてもう一度強調しておこう．相互作用は，厳密なニュートン的な見方では瞬時に伝わる遠隔相互作用であるが，場の見方では，ある点から隣接した点へ伝播する局所的相互作用である．場の概念においては，瞬時に伝播するという考え方はもはや存在しない．相互作用は実際ある限られた速度を持つ機構による時空中の伝播である．これがもちろん有名な光速度不変の原理であり，特殊相対性理論のすべての研究の出発点である．

以上のことから，二元論的な見方を持った理論が最終的に出現した．つまり粒子と場の見方であり，これらは共存し一方が他方を説明することはない．この根本的二元論が古典物理学の到達点である．**離散的**な粒子像の見方をとる狭い意味でのニュートン物理学は，粒子間に働く力が瞬時に伝播するのではなく場により伝えられるという**連続的**な見方のもとで修正された．そして場は粒子が相互作用するための動力学的な媒介手段を提供するために存在している．

これら 2 つのまったく異なる古典的な概念が融合され，古典的に対応するものが存在しない何物かへと超越していくことが量子力学のさらなる発展の目的となった．それは量子化された場という新しい概念であり，古典的二元論に代わる統合概念である．我々は古典的な背景から出発して，このはるかに深い量子力学の基礎と解釈に至るまでの発展をたどって行かなければならない．

たったこれだけにまとめることでは，数百年に渡り巨視的な世界と呼ぶ領域を支配する諸法則を築いた多くの物理学者の仕事を，正当に評価しているとは言い難い．しかし要約についてはここまでにしておこう．なぜならこの後に現れたまったく新しい世界と新しい秩序系は，原子の現象を扱う微視的宇宙の研究の中から出現したからである．地球上での日常の現象から惑星の運動など宇宙の現象に至るまでを非常によく記述できた諸法則が，観測された現象を説明することに失敗したのはまさにこの微視的な世界においてである．外ではなく内に目を向けたときに，新しい運動法則，新しい物理法則，新しい思考方法そして新しい哲学的概念を我々は発見した．

さて，それはどのようにして出現したのだろうか？ もちろん，数行の文章で 19 世紀の終わりから 20 世紀初めにかけて起こった物理学の途方もない発展を満足いくように説明することはできない．しかし次のことを心に留めて欲しい．その発展は最初はパラドックスと思えるものから始まったということを．すでに指摘したように，古典物理学においては，2 つの明白に異なる互いに対象を別とする記述体系があった．一方

の対象は粒子で，離散的であり，もう一方は場で，空間に連続的に広がっている．場はどのようにでも望むだけ減衰させることができる．電波は遠くへ離れて行けば行くほど，連続的に減衰していく．一方，粒子はそれに付随した離散的な性質を持っている．したがって，原子の現象の探求において，明白なパラドックスを発見したことは注目に値することであった．たとえば，光は干渉現象から典型的な波の性質を持つことが知られていた．これは場の現象であり，光は場に特有の仕方で空間に広がっている．ところがある適切な条件のもとで実験を行うと，光は粒子的な性質を持つことが発見された．光のエネルギーは，光が満ちている領域に単に連続的に分布しているという古典的な見解とは異なり，光はある決まったそして離散的なエネルギー量を運ぶことができるということがわかった．これは光があたかも粒子として振る舞うということであり，最初は単に光量子と呼ばれたが，今日では一般的に**光子**と呼ばれ，ある運動の状況では決まったエネルギーと運動量を持つという特徴をもちろん備えている．光がある状況のもとでは明らかに粒子的な挙動を示すということは，この分野の発展の初期に発見されたパラドックスであった．この 2 つの明らかに異なる互いに排他的な古典的概念が，微視的な世界ではある意味で同時に実現されたのである．1 つの例としては，光が金属に吸収され電子にエネルギーを与えて，電子が金属から放出されるという光電効果という古典的な実験がある．古典的な描像では，電磁場は空間に分布し，電子は偶然的な状況に依存してある時は多く，またある時は少ないエネルギーを吸収して放出されるはずであるが，これに反して実験では毎回決まった量のエネルギーが吸収された．

それゆえここでは，波動つまり場の典型的な例である光が粒子的に振る舞っていた．その逆も真であった．といってもその実験的な立証には 27 年ほど待たなければならなかった．しかし時が十分経過した現在から見て，これらすべてをひとまとめにして，発展の重要な一側面として実験的に逆もまた真であることが確立したと言っても許されるだろう．電子は微視的な世界の典型的な粒子の例である．電子ビームは真空管で作られ直進する．そして電場や磁場中に置かれると，物体と同じように方向を変える．しかし電子が結晶によって散乱されるという状況のもとでは，波動の特徴的な現象である干渉リングが発見された．言い換えれば，結晶中を運動している電子は，物体として散乱される代わりに，ある波長の光と同様の特徴的な干渉模様を生成する．本来本質的に古典的粒子だと考えられた物体が，新しい実験条件のもとでは連続的なつまり波動的な現象を示したのである．

このように明らかに同じ物体が，ある状況のもとでは古典的な粒子のように，また別の状況では古典的な波のように振る舞うという，注目すべき二重性を持つ結果が得られた．もちろんこれは過去の知られた物理現象の中ではまったく予期されていない現象であった．

その間，分光学的実験により明らかにされた原子の性質の詳細な探求が進行していっ

た．非常に希薄な気体を用いた適切な状況のもとで原子のスペクトルを観測することにより，個々の原子の振る舞いを調べることが可能になった．そして観測されたスペクトルを，原子の中の電子の運動によって理解しようという古典物理学による試みがなされたが，完全な失敗に終わった．実際，原子が単に存在すること，そしてそれが決まったスペクトル線を放射することが古典物理学と鋭く対立している．ラザフォードが 1911 年に発見したように，電子は中心の原子核の周りを運動しているという描像を採用すると，古典電磁気学の法則によれば，原子核の周りを加速度運動をする電子は放射を続け，最後にはすべてのエネルギーを失って原子核に落ち込む．このことは，まず第 1 に原子は安定ではないという，純然たる経験事実に反するあまりに馬鹿げた結論をもたらす．さらにこの過程において電子は原子核に近づくにつれて振動数が変化するスペクトル線を放射することになる．このことは個々の原子は特有の決まった振動数を持つ鋭いはっきりしたスペクトル線を放射するいう，実験結果とは似ても似つかぬものになるであろう．明らかに，巨視的世界を記述する物理法則は，微視的世界では完全に失敗した．

おもにニールス・ボーアを中心とするコペンハーゲングループの人々によって成された詳細な解析により，原子のスペクトルを理解するには次のような大胆な仮説を導入するしかないということが結論された．それは物理量(エネルギーや角運動量は 2 つの最も重要な物理量の例である)が，ある決まった値しかとることができないという仮説である．古典力学においてはこれらはどんな値でもとることができる．つまり古典的には連続的な量である．日常生活においては，適当な量のエネルギーを単に補給するだけで粒子にどんな値のエネルギーでも持たせることができる．また物体を回転させたとき，どんな値の角運動量でも持たせることができる．自然法則によって特別に選ばれた値というものは存在しない．しかし原子分光学の観測結果の解析は，原子，つまり原子の中の電子が持つエネルギーの値は連続ではなく，ある決まった値を持つと仮定しなければならないことを示していた．これが離散的なスペクトル線に対する唯一の説明であった．そして角運動量の値はどれも，プランクの作用定数として知られている新しい自然界の定数の倍数である．この作用定数は原子の世界の現象について非常に重要な特性を理解するために成された別の試みに関連して最初は発見されたものであった．

ここにおいて，我々は古典物理学の現象とのおもな断絶の最初の例と出会った．つまり古典的には連続的な値をとるはずの量が今や離散的な値をとる．これは言い換えれば，原子性(原子の持つ単一性，非分割性)の現象が微視的な世界を完全に支配しているという一般的な経験的認識である．我々は，古典的概念ではあり得ない原子の存在自体を説明しなければならない．古典的には物体を分割する限度に何の制限もあり得ない．しかし現実には物質の分割を際限なく続けることは不可能で，原子のスケールに達したときにそれ以上は分割できなくなるという事実は，何か新しいことが関係

していることを最も本質的に表している．原子性の現象は，原子の存在のみでなく，角運動量の原子性や作用の原子性などの運動法則にも現れている．すなわち原子性は微視的物理の基本的な現象であると，最も一般的に表現できるであろう．そして原子の物理的性質は，以前に知られている何物をも超越した新しい法則で理解されなければならないという事実を，我々は(私はここで「我々」と言ったが，もちろん当時私はこの発展に携わっていなかったが，この言葉に一体感を込めたい)議論の余地なく受け入れざるを得なかった．これは新しい世界であった．

微視的物理における基礎的な新事実として特徴付けられるこの原子性の現象以外に，同時に現れる別の現象が存在する．それは微視的な現象は本質的に統計的性質を持つということである．これが微視的世界が機能している仕方であるとして受け入れなければならないもう 1 つの基本的な特徴である．微視的な世界が必然的に統計的であることは，すでに述べた結晶と相互作用する電子ビームが示す回折現象の例から理解できる．さてこの回折現象がどのようにして生じるかを考えてみよう．結晶とは特有の間隔で原子が規則的に並んだものであり，この特徴的な構造により，結晶に入射してきた波は波長と結晶中の原子間隔の関係で決まる特定の方向に強く散乱される(この現象は X 線の場合についてよく知られており，実際この現象が X 線が波動であることの実験的証明の 1 つとなった)．だから電子を結晶に入射させ，スクリーンに向かって散乱される実験を行うと，電子はスクリーン上に干渉に特有な模様を作り出すであろう．つまり電子は多かれ少なかれランダムに一様な強度でスクリーン全体に到達する代わりに，特定の選ばれた場所に見出される．

さて，もし電子ビームの強度を弱くして，ある決まった時間間隔の間にちょうど 1 個の電子が結晶内のどこかを通って運動するようにすると，電子はスクリーン上のある確定した位置に到達して検出される．たとえばこれがシンチレーションスクリーンであるとすると，弱い強度の電子ビームが入ると，スクリーン上のある一点ですぐに閃光が見える．ここでは電子は最終的に観測されるとき，適当な化学反応によって閃光を生じその位置を示す粒子的特性を持つ．そして我々は電子がそこにいることを観測できる．1 個の電子ではもちろん干渉模様は現れない．干渉模様は一度では現れない．単に 1 個の電子があるだけである．この非常に弱い強度のビームで 2 番目の電子がスクリーンに到達したとする．何が起こるだろうか? 同じ場所に到達するだろうか? いやそうではなく，最初の電子とは関係のない位置にランダムに到達する．さて，さらに多くの電子をこのシンチレーションスクリーン上へ，同じ実験条件のもとで，そしてお互いに独立に到達させたとする．すると徐々に干渉模様が現れてくる．多くの電子がここに，そしてあそこにと到達して，強度の最終的な分布図が干渉模様を示す．しかしそれにもかかわらず，このことは電子がスクリーン上のいろいろな場所に，ランダムに到達した結果として生じるのである．

さて別の面の特性を強調するために，このような実験を行い 100 億個の電子がある

干渉模様，つまり相対的に強度が異なる分布図を最終的に作ったとし，さらにこの実験を繰り返すことにしよう．厳密に同じ実験設定を行い，電子ビームを発射し何が起こるかを見てみよう．再び最初の電子が結晶中を運動する．この電子は前回の実験の最初の電子と同じ点に到達するだろうか？ もちろんそうではない．同じように繰り返すとその様子は**全体的には**ランダムに繰り返される．第1番目の電子はどこかの場所に到達する．そして第2番目の電子は第1番目の電子および最初の実験とはまったく無関係にどこか他の場所に到達する．言い換えれば，個々の電子はまったくランダムに統計的に到達する．これを制御することはまったくできない．このことは半世紀の間制御しようとした様々な試みから得られた一般的結論である．微視的世界では個々の粒子がどのように振る舞うかは制御できないということは，受け入れざるを得ない描像である．しかし干渉模様は完全に決定できるし，そして毎実験ごとに再現できる．干渉模様の特徴的形態は予言可能であり，再現可能である．この明らかな実在の二重性(電子はある状況では離散的な実在，つまり粒子としてスクリーン上の決まった点に到達する，しかし別の側面では波として振る舞い，全体的な強度分布の特性において波の干渉現象を作り出す)に直面すると，干渉現象では1個の電子が毎回スクリーンに到着するたびに小規模に干渉模様を繰り返すのではなく，電子がどこに到達するかはランダムであるという側面が存在しなければならないことを認めざるを得ない．干渉模様は最終的には，単に相対的な確率を示しているにすぎない．そして無数に繰り返せば，どこに粒子が多くあるいは少なく到達するかが完全に規則的に決まってくる．

ある意味ではここで述べたことはすべて自動的に導かれる結論であるが，私は微視的現象を支配する法則の基本的特徴は統計的であるということをより基本的なものとして捉えたいと思う．一般にある特別の1つの事象の結果を予言することは可能ではない．我々が予言できることは，同じ実験を十分に数多く繰り返したときに最終的に得られる平均的統計的な結果である．そしてこれを予言することが，微視的物理学つまり量子力学の目的である．

微視的な現象は原子性を持ちかつ統計的であるという2つの新しい基本的な観点を1つの世界描像に取り込まなければならないという，微視的物理からの大きな挑戦を我々は受けている．しかし，新しい物理は統計的であり，それゆえ完全に決定論的であった古典物理学とは根本的に異なるということは，我々が失敗したということではない．我々は単に，何がこの新しい微視的世界の物理の本質でなければならないかを認識できたということである．それは個々の事象の結果を予言することではなく，むしろ平均としてどのような結果になるか，そして起こりそうな結果は何であるかを予言することである．そして電子の散乱実験，もしくはこの実験の単純化した描写が示しているように，統計性は我々が必然的に受け入れなければならない事実だということである．

おそらくここで述べておくべきだと思われるのだが，もし最初の電子が到達する位

置を正確に制御しようとすると，実際これは可能である．つまり，すべての電子が前もって決められた位置に確実に到達する実験装置を作ることができる．しかしこのときは，干渉模様は現れない．言い換えれば，我々はここでは2つの異なる状況について考えている．1番目は干渉模様が現れる実験で，ここでは個々の電子がどこに来るかを予言したり制御したりすることはできない．2番目の実験は電子が装置を通過しているときに，どこに来るかを制御し予言することができる実験である．これはまったく別の実験装置で，後者では干渉模様は決して生じない．つまり我々は微視的世界のいわゆる2つの異なる側面を扱っているわけで，一方かまたは他方であるかを示すには異なる実験設定が必要となる．

さて，微視的世界の2つの基本的特徴，すなわち，微視的事象の原子性と統計的な性質の存在を一旦我々は認めたが，それではどのようにしてこの奇妙な状況を取り入れる理論を構成していけばよいのだろうか．

その理論は，ある種の数学的モデルまたは数学的理想化であり，過去の物理学が常にそうであったと同じように，実験状況を完全に特定できるすべての条件が正しく与えられた場合は，結果を首尾一貫して予言できるような数学理論でなければならない．このような理論を構築するにはどのように進めていくべきかを考えるために，古典物理学(または微視的物理とは明白な差があることから巨視的な物理学と言ってもよいが)の背後にある基本原理(哲学原理と呼んでも結構だが)に戻って，もう少し目的意識を持って考察してみよう．

特に観測の理論について考えてみたい．ここでもちろん物理学は実験科学であり，実験によって立証することができる事柄のみを対象としているという，基本的で哲学的な考えを我々は認めなければならない．理論の目的は，実験によって確かめることができる結果に対して，統一的見解，または法則の体系化と言えるものを与えることである．したがって，自然科学の分野のすべての理論において基本的なものは，その適用領域内での観測の理論である．

さて，巨視的な古典物理学における観測の理論の特徴とは何であっただろうか？ それは，測定において本質的なことは，撹乱の無い測定という考え方である．物理実験室を一度でも訪れたことがある人にはもちろん明らかだろうが，測定の過程においてある特別な対象について情報を得るためには，何らかの方法で対象と物理的に相互作用しなければならない．しかしそれにもかかわらず，あたかも相互作用がなかったかのように物理量が何であるかを意味のあるように記述できるように相互作用を理想化したい(最も簡単なモデルとして，水の温度を測定するときに温度計を水の中に入れる場合を考えてみるとよい．理想的には温度計による撹乱は無しとしたいが，しかしながら温度計無しでは温度を測定することはできない)．よく知られているように，相互作用をするたびに，対象との相互作用の結果として何らかの撹乱は避けることができない(温度計を水桶の中に入れることで水の質量が変わり，測定しようとしている水の

温度はいくらか変化するだろう）．しかしもし相互作用がゼロであれば，情報を得る手段はない．その意味で相互作用はゼロにすることはできないが，望む限りどこまでも小さくすることができるという理想化された状況について議論することは意味があると主張し，またその主張が正しいということが古典物理学の特徴である．

対象としている系を撹乱しないように相互作用をできるだけ小さくすることは，実際には必ずしも必要ではないし，また常に可能でもない．たとえば，材料の性質を大きく変える化学変化を起こす測定もあり，その場合の化学変化は無視できないほどの撹乱を引き起こすだろう．ここで巨視的物理の第2の側面が大きな役割を果たす．古典物理学は因果的でかつ決定論的であるから，その避けがたい撹乱の効果を望む限り正確に補正することができる．よく知られているように，古典物理学においては，どのような測定においても理想化された撹乱の無い測定結果は何であるかを知るために，撹乱が何であったかを評価しどのように補正するかをきちんと計算できる理論的記述法が存在する．ここで古典物理学の測定における2つの基本的な特徴をまとめておこう．それは，撹乱を無視できるほどに相互作用を十分小さくできるか，もしくは実験の性質上どうしても撹乱を小さくできない特殊な実験状況においては，撹乱の影響を望む精度で計算し，補正することができるということである．

簡単に言えば，これが古典的な観測の理論である．これに関連するのは，たとえばニュートン物理学の状態という概念の説明にあったように，いかなる数の物理量であろうと同時にどんな精度ででも測定できるという考えである．状態とはすべての粒子の位置と運動量を決定したものであると主張するとき，実際これらの物理量をいつでも数値的に知る測定ができるという，全体の構成と調和している仮定が暗黙のうちに含まれている．同様の見解が空間全体における電磁場の分布の観測にも適用できる．

まとめると，古典的な観測の理論においては，状態を決定するために必要なすべての量を数値として，いかなる精度ででも与えることができる．そしてこのことは，理論が決定論的であるため，すべての物理量が一度に決定できることを意味する．古典物理学においては，すべての物理量に対して一貫して数値を付与できるので，物理的な性質とある時刻でそれらが持つ数値を決して区別しなかった．古典物理学においては，我々は常に抽象的な概念であると見なされる物理量に対して，ある特定の時刻での撹乱の無い測定結果と一致するであろう具体的な数値を割り当てることができる．

これが古典物理学の基礎を言い直している．すなわち，撹乱の無い測定という理想化と，それに対応する数学表現の基礎，つまり物理量に連続的な数値を割り当てることに何の障害も無いことによる物理量と数値の同一視化である．

さて，これとは対照的に微視的物理では状況はどうであろうか？ 数十年に渡って蓄積された膨大な量の実験データから引き出された結果として，微視的物理学の特質（または微視的観測の特質と言ってもよいが）は，原子性と現象の統計的性質という2つの基本的な題目で要約された．

これは何を意味するのだろうか．まず**原子性**について述べよう．原子性とは，微視的実体の多くの性質は何らかの基本的な単位を持っているということを意味する．電子の半分などというものは存在しない．電子は決まった質量を持ち，決まった電荷を持っている．もしいま考えている相互作用が静電的なものであれば，単位電荷をさらに半分にすることなどはできないから，その強さを勝手に小さくすることはできない．このことはまさに微視的測定と巨視的測定の基本的な違いを示している．測定について議論するとき，つまり物理現象について意味のある議論をするときには，それに必要な相互作用は勝手に小さくすることは一般的にできないということを考慮しなければならない．なぜなら相互作用する原子や電子などの物理的対象は，一般的に**量子**という基本単位で現れる物理量を持つからである．この量子とは，これから議論する主題である量子力学の語源である．

さてこのことは克服できないほどの困難ではなさそうに見えるかもしれない．古典物理学においてさえ，特殊な観測であるために測定による攪乱を小さくすることができないような状況もあり得ることを知っている．古典力学では測定のための相互作用は強く勝手に小さくすることはできなかったかもしれないが，しかしこのことが観測の背後にある哲学を覆すということはない．なぜなら相互作用の効果は何であるかを任意の精度で計算し補正することができたからである．

原子的測定においても同じことができるだろうか？ 答えは否である．なぜならここに微視的測定における第2の基本的な特徴が登場するからある．その特徴とは，現象は統計的であり，**個々の事象**を詳細に予言することはできず，**平均的**で統計的にしか予言できないという事実である．測定は強い相互作用を必然的に含む．繰り返すと，微視的スケールでは電荷の大きさを半分にすることもできず，粒子の基本的な性質を変えることもできないから，相互作用は必然的に強くなる．我々はこの基本的性質をそのままで受け入れるしかない．したがって測定が大きな攪乱を引き起こすことは避けがたく，また個々の事象に対して何が起こるのかを詳細に制御することができないから，個々の場合にそれらをどのようにも補正することはできない．何が起こるかは**平均的に**予言し制御することができるだけで，**個々の場合に**はできない．それゆえ，攪乱の影響はどうだったかを計算し補正することは一般的に不可能である．したがって，巨視的観測理論の2つの基本原理がともに破られている．つまり相互作用を小さくしようとしても，原子性により任意に小さくすることはできず，またこのことを認めて補正しようと思っても，個々の事象を詳細に決定する決定論的理論を持っていないから不可能である．我々はただ統計的平均値を予言したり制御したりする能力だけを持っている．

以上より，微視的物理の膨大な実験データから得られる一般的な結論とは，もし微視的物理の理論を作ろうとすればまったく新しい微視的観測の理論を必要とし，そのためには，物理量がある時刻にある値をとるということがもはや無意味であるような

まったく新しい数学体系を必要とすることである．言い換えれば，これらの根本的仮定の失敗は，微視的世界における物理現象を，巨視的世界つまり古典的な領域で使った時間とともに変化する数値によって表現はできないということを意味していると私は指摘したい．微視的な測定の基本的な事実を表現するもしくは模倣する，これまでとはまったく異なる数学的な性質を備えた何かが必要とされるのである．

問題点を強調するために，以下のことを述べておこう．巨視的には，1つ物理量を測定し，それに1つの数値を割り当てる．そして2番目の物理量を測定し，1つの数値を割り当てる．するとこれらの2個の数値をある時刻の2個の物理量の測定値として扱うことができる．ここには何の矛盾もない．そして仮に理想的な方法で，2番目の物理量の測定の後で速やかに最初の物理量をもう一度測定したとすると（または最初の測定を繰り返せるような環境を再現して），最初の物理量が以前と同じ数値を持っていることを検証できる．

これとは対照的に，ある原子系において何らかの方法で1つの物理量の測定に成功したと仮定しよう．そこで第2の物理量の測定を行うとする．この測定は必然的に相互作用を含み，それは任意に弱くすることはできず，その影響を制御することもできないし，最初の測定の状況を変化させてしまうであろう．言い換えれば，系は2番目の測定により制御不可能なほどに攪乱され，もとに戻って最初の物理量を測定し，以前の値と同じかどうかを検証しようとしても同じ値は得られず，測定のために行ったことの詳細に依存する確率にしたがって，その物理量がとり得る種々の値をランダムにとるだろう．これは2番目の測定が新しい物理的状況を作り出したからである．2番目の測定による相互作用は系をあまりに激しく攪乱するので，特別な状況設定以外では，最初の物理量の測定値が2番目の測定の前に持っていた値と同じであると言えるような，厳密に以前と同じ物理的な状態にあるかどうかを知る方法はまったくない．言い換えれば，測定する**行為**が測定する**対象**を攪乱しそして制御できないほどの変化をもたらすことを認めるなら，測定を行うたびに測定以前とは本質的に異なる新しい物理的状態を作り出していることを認めざるを得ない．

そこでもし2つの物理量を，ある順序またはその逆の順序で測定しようとすると，もちろん古典的にはまったく差が無いのだが，微視的世界ではこれらはまったく異なる2つの実験となる．物理量 A をまず初めに測定しそれから B を測定するときに生じる微視的世界での攪乱と，それとは逆に物理量 B をまず初めに測定し，それから A を測定するときに生じるまったく異なる攪乱とに対応して，異なる物理的な状態が生じる．そして最終的な物理的状態が，微視的測定が行われる順序に決定的に依存するわけだから，物理量 A と B がこれこれの値を持つということは一般的に不可能である．つまりこれら両方の値が意味を持つのは，どの順序で測定しようと同じ値を持つときのみであろう．例外的な場合を除いて，最初に A を次に B を測定するときは，B のみが測定で得られた値をとる状態となり，最初に B を次に A を測定するときは，A

のみがその値をもつ状態になる.

したがって，微視的測定に対する数学体系は，物理量を数値で表現するものでは明らかにあり得ない．なぜなら数値は測定を行った順序に依存するという性質を持っていないからである．2つの物理量に対して2つの数値を割り当てることでは，測定の順序の意味とか測定が続いて起こるという意味を導入したことにならないからである．数値の代わりに，数学的な演算の順序により物理的な操作の順序を表現できる新しい数学体系を探さなければならない．結論的に言うと必要でかつ成功した数学体系は，物理量を数ではなく積の順序に依存する代数の元によってきわめて抽象的に表現したものである．言い換えれば，これら代数記号の積が，続けて測定を行うことに正確に対応している．測定において避けることができない攪乱を生じるために，測定の順序が重要であることは，これらの代数記号の積の順序が重要であるということに反映される.

このようにして，物理量を順序を交換できないつまり非可換な代数の元に対応させるはるかに高度な奥の深い数学体系に到達した．それらの元は，物理量を**数値**で表すきわめて単純な表現と対比して，しばしば非可換**演算子**と呼ばれる．そしてすべての物理的な状態(ここでまた状態という言葉が再び出てきたが)は，これらの演算子が演算するある抽象的な空間の**ベクトル**に関係付けられる.

これらすべての結果として，微視的物理の一見奇妙で不可解に見えるすべての事柄をみごとに説明する非常に美しい数学体系が生まれた．この原子観測の記号による体系化が，我々の現在の見方からするとまだかけ離れてはいるが，ハイゼンベルク，ボルン，シュレーディンガー達により1925年から1927年にかけて展開されてきた量子力学である.

ここで，同じ一般的な枠組みの中で量子力学の性質が何であるかを説明しよう．これは古典論と同じく因果的な理論である．ある時刻で状態が与えられれば，他のいかなる時刻での状態も一意的に決定される．しかし決定論的理論ではないという点で異なっている．すなわち量子力学は因果的で**統計的**な決定論的理論である．ある時刻での状態がわかれば他の時刻での状態は決まる．しかし状態がわかることで，どのような情報が得られるだろうか？ 古典論においては，状態がわかればあらゆる情報を得ることができたことを思い出して欲しい．つまり粒子がどこにいて，どのように運動しているのかがわかれば，興味のあるいかなる物理量でも任意の精度で予言できる．しかし先ほど述べたように，微視的な世界においては任意の精度で個々の予言をすることはできない．とは言っても，観測の科学においては正確な予言ができなければならない．量子力学においては，ただその正確な予言が統計的性質を持っている．状態がわかればいかなる物理量の測定に対しても，統計的平均的な結果を予言することはできるが，個々の事象の結果を予言することは決してできない．言い換えれば，もし状態がわかれば，ある特定の物理量の測定を繰り返し行った結果が何になるかを予言す

ることができる．完全に明確な統計的予言はできるが，個々の事象の予言はできない．

繰り返そう．異なる時刻での状態間の因果関係は確かに存在する(このことは誰もが知っているように物理のどの分野でも基本的であると思われる)．しかし，状態を知ることはすべての物理量の詳細な情報が得られることを意味するのではなく，一般的には単に物理的性質の平均的もしくは統計的な振る舞いがどうなるかを知ることを意味するということが大きく変わった点である．これが，ある意味では理論の初期の発展において発見された注目すべきパラドックスに対する，最終的な理解である．これらのパラドックスは個別的な決定論ではなく，統計的な決定論の見地から解決された．

今まで状態という言葉を用いてきたが，状態がどのように定義されるかについては何も示さなかった．これに対する答は，古典模型にきわめて近い物理系の模型を考えることから得られる．たとえば，原子は正の電荷をもつ原子核によるクーロン引力の場の中を運動している電子(小さな物体で，負の単位電荷を持つ)によって，簡単に理解されるはずであると考えることから我々は出発した．これは，定まった力の法則と有限の決まった数の物体というニュートン力学の枠組みに当てはまるように思える状況である．古典理論が失敗したのは，力学的な描像が間違っていたからではなく，微視的物理を記述する法則が異なっていたからである．それらの法則は詳細で決定論的な予言を許すものではなく，統計的に決定論的な理論の性格を持っている．

これは描像としては古典的な物理模型である．原子を記述するときに，何個の電子が存在し，原子核の電荷はいくらであるというように，この描像は我々の思考に関する限りいまだに古典的である．異なるのはどのように計算を進めていくかである．簡単のため，ただ1個の電子を持つ水素原子を考えてみよう．ここに電子が存在し，その電子は位置とか運動量という物理量を持つ．そして古典的にはこれらの位置と運動量を同時に測定することができ，しかもいくらでも正確な精度で決めることができる．しかしこれが原子の中の電子の状態を決める適切な定義では無いということが，量子力学という数学体系に最終的に至る発展の流れを通して物理学者が学んだことの本質である．状態を特定するために我々がせいぜいできることは，位置と運動量という古典的な物理量のすべてに同時に数値を割り当てるのではなく，それらの**半分**だけに対してできることである．

実際，どこに電子がいるかを正確に決める実験的状況を作り出すことはできる．電子がシンチレーションスクリーン上に到達すれば，電子の位置は閃光によって実質的に明示される．また電子の運動量を正確に決める実験的状況を作り出すこともできる．実際，電子ビームの実験を記述するときは，このことを念頭に置いている．ここにある方向にある速さで運動している粒子があり，定まった質量を持つとすると，これより運動量が決まる．しかし，運動量を知ると粒子の位置を知ることはできない．スクリーン上にランダムに到達する粒子によって形成される干渉模様の出現がこの事実を示している．

一方，電子があらかじめ決められた場所に到達するように設定した，別の実験的状況を作ることも可能であろう．そして電子の位置を測定すると，この結果がどうなるかを正確に予言することができる．しかしこのときには，運動量が完全に決まっている物理的状況の特徴としての干渉模様は，決して現れないであろう．

根本的に変わったものは，状態の性質である．ある決まった数の粒子，たとえば電子があるとしよう．その量子状態を特定することは，それらの粒子がある時刻にどこにいるか，またはある時刻にどのように運動しているかであり，決して両方を同時に決めることではない．実際，古典物理学における状態の記述が，どこに電子がいてそしてどのように運動していたかであったことと比べ，量子力学においては，状態は半分の物理量に対して測定結果が何であるかを任意の精度で与えることで記述される．しかし残りの半数の物理量については個々の値を予言することはできない．それらは単にランダムな確率分布を持つであろう．

位置を正確に知っている状態に対して，何度も位置の観測を繰り返したとすると，常に測定値は元の値と正確に一致するだろう．しかし，その状態で運動量の測定を行ったとすると，決して定まった値は得られず，ランダムな統計的分布が得られるだけである．そして位置を正確に決めようとすればするほど，観測される運動量の分布の幅は広がっていく．

この簡単な状況が，微視的物理の一連の研究から現れたおそらく最も広範な哲学的原理が何であるかを本質的に表している．これがボーアの相補性原理として知られているものである．アインシュタインとド・ブロイの名前に結びつく，いわゆる波動と粒子の二重性という言葉を，今までも使ってきたし今後も使用するが，これは相補性の例である．波動と粒子の二重性とは基本的な相補性の単なる１つの帰結であることが，一般的な発展の中で確立した．

相補性の考えによって，最初は一見パラドックスのように見えた事柄を一般的な枠組みの中で，最終的に統一することができる．電子は，ある特定の実験状況のもとでは粒子のように振る舞い，また別の実験状況のもとでは波のように振る舞う．このことと，状態はこれらすべての物理量ではなく半数だけを用いて定義されるという洞察を用いてより正確に表現したこととは，いわば同じことである．どの物理量が決められた値を持つようになるかを選択し，それを実現する実験状況を設定することは可能である．たとえば，波は実験家にとって運動量が決まった値をとるようにした実験状況の選択を表しており，そこでは位置を制御することはできない．

ボーアの相補性原理は，まず第１に微視的物理は古典的な類似が成り立たない新しい世界(これは認識すべき重要なことである)であるということを述べている．しかしそれにもかかわらず，古典的性質の類似性が成り立つ状況が存在する．たとえば電子はある状況のもとでのある測定に関しては粒子として記述できるし，また波として記述できる別の状況も存在する．まったく異なるこの２つの古典的な描像は，異なる物

理的な状況のもとで成り立つが同時には成り立たず，一方の描像が適用できる場合は，他方の描像は決して適用できない．すなわち，この2つの古典的な類似性は排他的である．しかし両方の描像は同じ基盤の上に立っている．一方は適用できるが，他方は適用できない実験状況を作り出すことが可能である．相補性の考えとは，微視的世界を完全に理解するには，両方の描像を適用することによってのみ可能であるが，いずれの描像もそれだけでは完全ではないということを表している．両方の描像が存在しなければならないが，一方が適用されれば，他方は排除される．

これは本質的には，古典的哲学的思考法には対応するもののないまったく新しい状況である．それは議論の余地なく受け入れざるを得ないものである．少なくともすべての物理学者がそれを受け入れてきた．それは本質的に微視的物理の法則を理解してきた方法であり，その結果量子力学の莫大な成功を収めた発展が出現した．数年の間のうちに，微視的な現象に量子力学を応用することで，伝統的に古典物理学の難問と見なされてきたものは完全に一掃された．実用的ではないにせよ，少なくとも原理的には，化学の問題は物理の問題に帰着した．通常の環境における，物質のすべての形態の多様な性質は，いくつかの簡単な事実で理解できることがわかった．少なくとも原理的には，量子力学の法則と，問題としている物質の特定の配位の情報がその物理的性質を理解するために必要なすべてであり，しかも実用的にも大きな成功を収めている．このことは固体物理学の基礎理論の膨大な発展やその他の多くの応用に示されている．

これらすべては，量子力学に体系化され統合された原子物理学の諸法則を理解することで得られた大いなる成果である．

基礎的な意味では，量子力学は1927年に完成された．しかしながら，それはもちろん物理学者による物理の世界の探求の終わりではなかった．より高いエネルギーそしてより小さな距離の世界という，まったく新しい未経験の領域を求めて発展し続けた．これまでは，原子について何度も話してきたが，原子の中心には原子核があり，原子核は核子からできている．そして今日理解されているように，核子はより基本的で根元的な実体から作られている．探求はさらに続いて行く．

どのような形で発展して行ったのかを少しでも理解するために，すでに以前に述べた考えに戻らなければならない．それは，量子化された場という概念である．というのは，これはおそらく微視的現象の枠内で学んだことを最も深遠に表現しているからである．ここでこの考えを，微視的物理の現象においてまったく新しい転換となるもう1つの基本的哲学的考えを用いて導入しよう．それは同一性あるいは識別不能性(不可弁別性)という概念である．古典物理においてさえ電子について話すとき，電子という単なる用語を用いることで，我々は電子はすべて同一であると理解していることはもちろん明らかであろう．電子の基本的な偶発的でない性質，たとえば質量や電荷その他の複雑な性質を，この電子またはあの電子で測定したとしても，必ず同じである．

これが自然の同質性という基本的な概念であり，これなくして物理学は決して機能し始めなかったであろう．ある特別の物質の試料は外的条件が同じ限り，別の試料と同じであると仮定しなければならない．

たとえば真空の箱の中を運動している2本の電子ビームのように，古典的に2個の電子を記述するときには，一方の電子は他方の電子とちょうど同じであると我々は理解している．そして**古典物理学**ではこのことが特別なことを意味しているわけではない．なぜなら，古典物理学においては電子の同一性つまり識別不能性にもかかわらず，これら2個の電子を区別することに何の困難もないからである．この電子はこちらの領域から来て，あの電子はあちらの領域から来たということができる．古典的には，これらの粒子の軌跡を詳細に追うことができ，どの瞬間においても，この電子はどちらから来たと正確に言えるし，電子の出発点から連続的に経路を追跡できる．これらの電子がたとえば真空箱もしくは真空管の中を複雑に相互作用しながら運動していたとしても，古典物理学の法則を用いて，少なくとも原理的には如何なる段階ででも，どれがどの電子だということを正確に同定できるであろう．

さて，古典的な法則に支配されていない微視的世界の本質を認識すれば，状況はまったく異なるであろうことは直ちに理解できるであろう．たとえば衝突実験を考えてみよう．2本の電子ビームがあったとする(電子でなく陽子でもいい．重要なのは，いま問題にしている自然法則がいかなる物質をも支配していることを認識する点である．電子を例にとるのは単に歴史的な慣例であって，これらは陽子でも，中性子でも，ハイペロンでも，π 中間子でもよい．物理法則は同じである)．さて，これら電子が衝突するとすれば，お互いに相互作用をする．ここで電子は古典的な振る舞いとは異なり，詳細な軌道をたどることはしない．なぜなら軌道が意味を持つためには，常にこの実験の本質を乱すことなく，どの電子がある瞬間にどうであったかを，正確に調べることができなければならないからである．このことは高い精度の制御と決定論を必要とするが，これは微視的な世界では不可能である．もし互いに向かって真っすぐに進んでくるような実験状況を設定したとすると，電子は定まった運動量を持つことになる．すると，すでに述べたようにこれと相補的な物理測定は詳細には実行できない．つまり，電子がどこにいるかということを詳細に知ることはできないし，電子の位置について述べること自体意味を持たせられない．

そして最終的にこれらのビームが分離した時点では，電子を個々に識別できることは疑いないが，しかし何が起こったかを詳細に追跡することができないから，どの電子が衝突前のどちらの電子であったかを告げる正当性も能力も我々は持っていない．言い換えると，これらの基本的な物理的性質である原子性，統計的性質，個々の事象を詳細に制御することの不可能性などのために，本質的に実験的な意味において，相互作用しているどの時点でもどの粒子がどれであるということを告げることができない．したがって記述は，各々の粒子に名札を付けることは根本的に不可能であるというこ

とを，考慮したものでなければならない．繰り返しておこう．名札を付ける実験はあり得ない．なぜならそうするためには散乱実験に介入し，詳細にわたり微視的に局在化させる実験を遂行しなければならないが，それは衝突実験の性格を完全に変えてしまう．これは単純な衝突実験ではもはやなく，これらと相互作用する同程度に重要な別の何かが介在することになる．これは明らかに**異種類**の実験である．そしてもちろんこれが主要な核心である．すなわち実行しようと望むすべての測定は実験の条件を変えてしまい，進行している他の事柄に強い制御不可能な干渉を持ち込んでしまうので，行おうと考えているすべての測定実験を正確に詳細に示さなければならないという認識である．これらすべての最終的な結果として認識すべきことは，多粒子系の状態の記述は，必然的に，これらの粒子は識別が不可能で，特定の名札付けは意味が無いという事実を最初から組み入れたものでなければならないということである．このことは，多数の識別不能な粒子系を扱うときには，寄与するすべての粒子が完全に対称的に記述された状態のみが許されることを意味する．

さてここで「対称的」という言葉はより一般的な意味で理解されなければならない．状態は伝統的には波動関数として知られている数値によるもので記述される．ベクトルもしくは状態ベクトルというものを私はすでに述べたが，これは抽象的な実体であり，波動関数はこれらの抽象的なベクトルの数値的表現である．複数個の同種粒子系の波動関数は，たとえばそれらの粒子の位置座標の関数である．もっともらしい唯一の記述法は，この波動関数がこれら粒子の位置に関して対称であり，したがってすべての粒子は厳密に同じ立場にあるというものである．この粒子は１番目で，あの粒子は２番目などという勝手な名前の付け方は，どのように順序を付けようともその状態の波動関数は同じであるということを要求することによって，粒子を区別するという意味を取り去ったものでなければならない．状態そのものは，同種粒子の間で別の順番を付けたとしても不変でなければならない．しかし，このことは状態を対称かまたは反対称(先に述べた「対称的」という言葉のより一般的な意味)にすることで保証される．このようにして，同種粒子系においては２つのまったく異なる型が存在することが認識できる．実際，基本的な例として用いてきた光子と電子については，物理現象の詳細な性質より，光子は対称な状態の類に属し，電子は反対称な状態の類に属することが示される．

これらの波動関数について，１粒子系から詳細に調べてみよう．この波動関数は単に粒子の位置(たとえば位置を指定する３個の座標)と時間の関数である．場とは結局は物理的に空間と時間に分布した対象だから，これは場を記述していると言ってもよいかもしれない．時空間の構造に関する限りでは，これはマクスウェル理論の電磁場と非常に類似したものであり，波動関数はある種類の場であるように思えるかもしれない．しかし多くの粒子を扱い始めると，その波動関数は２個，３個，もしくはもっと多くの位置(と時間)の関数となるから，もはや通常の意味での場ではあり得ない．言

い換えれば，多粒子系でははるかに抽象的な多次元の配位空間を扱う．多粒子の波動関数は，同時に多数の粒子の3次元座標を考慮するため通常の3次元空間の座標とは非常に異なり，より仮想的な高次元の数学的な空間を使って多くの粒子がどのような運動をしているかを表現する手段である．

1粒子，2粒子，3粒子の状態を考えていくことにより，明らかに状況はどんどんと複雑になっていく．しかし，ゼロ粒子状態，つまり**真空**という状態も存在すると認識することにより，見通しに関してきわめて実り多い変化が始まる．1粒子状態はここに1個の粒子を作ることにより生じると考えることができる．まず真空があり，そこへ粒子を1個作ると1粒子状態ができる．さらにもう1つの粒子を作ると2粒子状態，そして3番目，4番目の粒子と作っていくことで多粒子系の状態が作られる．目下のところ，これは単に想像の産物であり，理想化された抽象的な生成過程以外の何物でもなく，ある意味では記録付けを簡単にしているにすぎない．何がこれを有益でしかも重要なものとしたのかというと，それは粒子が物理的に生成されたり消滅したりして粒子数が変化する実験的状況を取り扱うことが今や可能になったからである．

数学的な表現では，粒子の生成を生成演算子を作用することで記述する．たとえば，5粒子状態に生成演算子を作用すると結果として6粒子状態となる．これは我々が通常考え慣れているものを越えた物理的性質を記号化したものであり，ある状態から1粒子だけ多い状態を作るように作用するものであるから，数値的な量ではなくむしろ演算子である．

そこで，たとえば真空に生成演算子を作用して時刻tで粒子1を作り，そして同じ時刻tで粒子2を作る場合について考えてみよう(生成演算子を繰り返し作用させることで任意の数の粒子を作ることができるが，ここではとりあえず2としておく)．このようにして，本質的に位置と時間tの両方を含む2粒子系の波動関数の性質を持つ状態を作ることができる．そしてここで重要なことは，この波動関数に対する対称性(または反対称性)の要求を，これらの演算子の代数的な性質に転換できる点である．もし光子の場合のように対称であるという場合は，2個の生成演算子をどの順序で作用させても結果は同じである．このように演算子の積が順序に依存しないということが対称な状態を生成する．電子のように反対称な場合は，ある順序で掛けた場合は，その逆の順序で掛けた場合に負の符号を付けたものになる．言い換えれば，同種粒子の統計性と通常呼ばれるこの2種類の性質は，これらの演算子の代数的な性質に置き換えられる．要約すると，どのような粒子数の系に関心があろうと生成演算子を作用させて作ることができるから，決まった数の粒子からなる系を考える代わりに，粒子数とは関係のない対象について考えればよい．それゆえ基本的な物理的対象としては，この演算子について考察すればよい．これが**量子場**と呼んでいたものである．これは一方では場であり，時空間で連続的に変化する数学的な量である．他方，これらの演算子は同時に測定可能な物理量ではないから，もちろん古典場ではない．そして積の意

味が重要(ここで述べることができるよりもっと深い意味において)であるという演算子的性質の中に，粒子概念の本質である不連続の要因が含まれている．

粒子の離散性とそして場の連続性という2つのまったく無関係な古典的概念が，今や量子化された場というまったく新しい概念で統一された．いやむしろ統一以上であって，この新しい概念は2つの古典的概念を超越したものである．古典的な意味では離散的でかつ連続的であるというものは存在しないから，この2つは結局は両立しない．これら2つの性質のどちらも持たずに，しかも極限的な状況においては，これらの慣用的な概念のどちらかで特徴付けられるものに我々は到達した．

つまり，これは量子化された場という考えでもたらされた根本的な統合である．今まで量子場を用いて粒子の生成の作用を議論することがいかに可能になったかを強調してきたが，それに対応して，いろいろな時空間において粒子が消されるという，生成とは逆の消滅の過程も量子場を用いて同じように説明できることは明らかであろう．

歴史的には，量子場は最初は単に識別不能な粒子の数学的な性質をまとめる便利な手段として現れた．しかしすぐに，実験科学の絶え間なく拡大する発展により，単に数学的な理想化と考えられていたものが現実のものとなった．つまり，有名なアインシュタインの関係式 $E = mc^2$ による粒子の静止エネルギーを供給できる十分なエネルギーを得ることが可能になった．質量 m に対応するエネルギー E が与えられれば，物理的に粒子を生成することができる(しかしたとえば電荷の保存則のような別の理由で，粒子を対で作る必要があるかもしれない．実際，負の電荷を持つ電子の場合は正の電荷を持つ相棒の陽電子とともに作られる)．

1930年代初頭までにこれらの実験は遂行された．その後，はるかに大きなエネルギーを必要とする陽子と反陽子，中性子と反中性子の対が作られ，現在までに自然の構成単位として知られている大部分の粒子(粒子対)が実験的に生成されている．これらの実験だけが，それから生成と消滅という記号化の解釈において量子場に対して物理的な実在性を与えている．

しかし，我々が知っている粒子に直接結び付く量子場を導入した場合，必然的にこの1対1の対応を持続することができないことが，発展の過程でまもなく認識された．抽象化の新しい段階に到達する必要があり，そして到達した．量子力学の最初の隆盛期においてうまく説明された原子世界の現象の性質を，実験データの精密化から来る要求に促されて，よりよく理解しようと試みられた1940年代後期から1950年代の間に，この抽象化が行われた．実験は続行し，ますます精緻な性質がわかってきて，理論のいっそう進んだそしてより鋭敏な応用が必要となってきた．たとえば，原子中の電子の場合は，場の観点からすれば，実際に2個の場の動力学が関与している．電子とその相方である陽電子に結び付いた量子場があり，また古典的には電磁場である光子の場に結び付く量子場がある．光子の場と電子の場は相互作用をしている．その結果，この物理的な名称によって各々の場を同定することは単に近似的なものにすぎな

くなる．もし２つの場の間の相互作用が十分弱ければ(ここの例ではかなりの程度そうであるが)，物理的な名称を場という数学的対象と関連して用いることができる．しかし，今や２つの場の間の相互作用をきちんと考慮しなければならないより精緻な理論においては，物理的に電子と呼んでいるものは，電子の場とは部分的にしか結び付いていないということを認識しなければならない．物理的な電子は相互作用をするために，部分的には光子の場とも結び付いている．物理的には，電子はあるときは光子を放出できるし，また再吸収することもできる．言い換えると，我々が物理的に電子と呼んでいるものは，より深いレベルにおいて，あるときは電子の場のみで記述され，またあるときは光子の場も含む．そして逆に，我々が真空中を伝播している光子と呼んでいるものも，単に対応する光子の場の生成演算子を作用させてできた結果ではない．なぜなら光子は空間でしばしば物質化して電子と陽電子対に変化することができ，それらはしばらくして再び結び付いて光子となるからである．

言い換えれば，光子と呼んでいる物理的な実体は，真空に数学的な光子の生成演算子を作用させて作られたものと常に同じというわけではない．つまり電子や陽電子を生成する他の演算子もまた関与してくる．ひとたびこのことを認識すると，物理的な記述における２つの段階を区別することになる．１つは微視的実験の膨大な結果の詳細な解析の中から，電子と光子の性質を識別するという現象論的段階である．もう１つはより基本的な対象であるこれらの量子場を用いて，理解を深めようとする試みである．この量子場はもはや直接現象論的な粒子に対応せず動力学的発展を通して対応している．実際，いわゆる量子電磁気学と呼ばれる理論の発展を通して，電子と光子の場合に適用された繰り込み(専門用語であるが)の手法で，電子と光子の振る舞いのいくつかのより精緻な性質を基本的な段階で記述することが可能になった．かつては異常と考えられた予期されなかった現象が，この深化した理解により予言された結果と一致するようになった．我々の最も深遠な理解とは，実際目にしていることで得られるのではなく，より基本的な段階において得られるという教訓をここで学ぶことができる．

物理学は歴史を通していつもこのように進歩してきた．基本的実体として原子から始まり，そして原子の性質を，電子と分解不可能な原子核によって理解しようと試みる．そして原子核の段階まで行き，それを核子の性質で解析する．そしてさらに次へと進んで行く．非常に単純に言うと，より小さな粒子そしてより小さな空間領域へと進んで行くという考え方である．

我々が知っているように，場と関連させて粒子を解析することは，少数の性質を持つより基本的な量子場による簡単化，すなわちより少ない任意定数を持つ深遠な記号による法則化を目指した，もっと深い段階での理解を得ようとする試みである．たとえば，電子の電荷，質量，および磁気モーメントがすべて互いに無関係な定数であるという実験的状況とは異なり，より深い理解とはこれらの物理量をより少数の基本的

な性質で説明しようとする試みである．

量子電磁力学の場合，研究はこのように進んできた．これは微視的現象に対する最も深い段階での我々の理解は量子場という概念で表されるという考えのきわめて成功した応用例である．しかし，すでに述べたように，そしてまたある程度は知られているように，より高いエネルギー加速器の開発により，ますます多くの粒子が発見され，これらは途方に暮れるほどの多くの性質を持っていた．いくつかの粒子は安定であり，その他の粒子は不安定であり，考え得るあらゆる可能な方法で互いへと崩壊して行く．十分なエネルギーがあれば，明らかに強い相互作用の結果としてこれらの粒子は非常に大量に生成される．そしてゆっくりと順次崩壊して行き，我々が知っている電子，陽子や他のいくつかの安定な粒子へと落ち着いていく．

さて，これらの原子核の現象の基礎的な研究で現われた相互作用は，電磁相互作用とはまったく異なる種類のものである．電磁的相互作用は本質的に弱い相互作用である．この基礎の上に，電磁的相互作用を扱うための技術的な方法を発展させることができた．しかし原子核を束縛させるだけでなく，核子を構成する粒子をも結び付けるより強い結合力に直面したとき，現象が困惑するほどに複雑だというだけではなく，何が起こっているのかについて特別の仮説を推論できるような数学的な手段を持っていないという意味で，我々はより大きな困難に遭遇している．そしてこの結果として，この段階での本質的な理解とは何であるべきかという疑問が起こっている．

量子電磁力学においては，動力学的な相互作用の複雑性の結果として最終的に我々が見るような世界の多様な性質が現れるという，基本的な量子場による深い理解を得た．同じように，核物理現象においても，理想的にはごく少数の基本的な場を用いてより深い理解を探索するというこれまでの観点を継続すべきであろうか？ それとも，このような試みを完全に断念し，この困難を根本的に解決することは不可能だと予見し，単に種々の微視的な粒子を用いて実験を行い，そこで生じた出来事だけで自然を記述しなければならないのだろうか？ 我々は電子や陽子を種々の原子核の中に送り込み，これらを小さな領域に侵入させる実験を行う．しかしそこで何が起こっているのかを記述することはせず，これらの粒子が再び分離したときに何が生じたかを最終的に記述しようと試みるだけなのだろうか．理論物理学の目的は，粒子が互いに相互作用し分離したときに起こる事象の一覧表を作ること以上のものではないのだろうか？ それとも，直接的には観測されないが(根底にある量子場のようなもの)，それによってより基本的な理解が得られるという一段と深い段階での理解を目指すものなのだろうか？ この質問は(率直に言ってきわめて単純化されているが)，ますます高くなるエネルギーを用いて新しい種類の物質を生成し，複雑に出現した物質の構造や物質の基本的な構成要素を研究し理解しようとしている高エネルギー物理学の最前線において，理論物理学が直面しているある意味で深遠で哲学的な問題なのである．

A. 秋学期：量子運動学

第1章

観測代数

1.1 シュテルン・ゲルラッハの実験

諸君はすでに，ド・ブロイ*波とシュレーディンガー†方程式にかなり偏った学部の量子力学の講義に触れたことはあると思う．私はこのような簡単な波動力学による方法が全体の主題の一般的な基本であると考えたことはない．そこでそれに代わるまったく一般的な基盤によって諸君の意識を改革したいと思う．

学部の講義についての私の印象を整理している最中に，ある初等的な教科書に目を通していて以下のような文章を見つけた．

> 量子力学の法則はニュートン‡の法則やマクスウェル§の方程式と同様，一般的な原理から導くことはできない．しかし理想的には，これらの法則はいくつかの選ばれた実験の簡単な論理的結論として，多少とも直接的に導かれることを望まれるかもしれない．残念ながら，自然の量子力学による記述はあまりに抽象的でそのことは可能ではない．

この最後の悲観的な主張にもかかわらず，私は選ばれた実験－実際はただ1種類の実験－から量子力学の一般的な法則の，理想的な帰納的導出(より正確な用語)を示したい．

この実験とは，1922年にシュテルン¶とゲルラッハ‖によって最初に行われ，その後発展してきた原子ビームを使った磁気的な性質の測定である．強磁性体を除くと，磁場が存在しなければ物質は磁化されない．常磁性体はかけられた磁場に比例する磁化を得る．これは磁場が熱運動による無秩序化に対抗して各原子の磁気モーメントを揃えるとして理解される．したがってこれは原子の磁気モーメントの間接的な測定であ

---

*Prince Louis-Victor DE BROGLIE (1892–1987) †Erwin SCHRÖDINGER (1889–1961) ‡Sir Isaac NEWTON (1643–1727) §James Clerk MAXWELL (1831–1879) ¶Otto STERN (1888–1969) ‖Walther GERLACH (1889–1979)

る．一方シュテルン・ゲルラッハの実験は磁場の力学的な効果を使って原子の磁気モーメントを直接測定することを試みたものである．

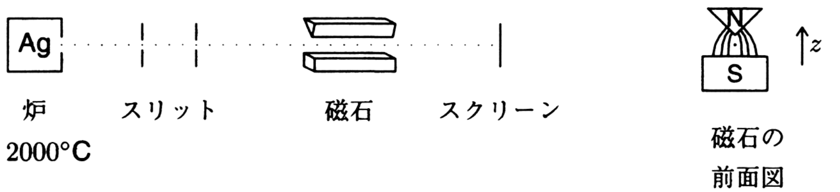
磁気モーメント $\boldsymbol{\mu}$ は磁場 $\boldsymbol{B}$ 中では $-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}$ のエネルギーを得るから，これに働く力は以下のようになる．

$$\boldsymbol{F} = -\boldsymbol{\nabla}\big(-\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})\big) = \boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{\mu}\cdot\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r})\,. \tag{1.1.1}$$

シュテルン・ゲルラッハの実験では，ある場所において磁場 $\boldsymbol{B}$ は1成分 B_z だけを持ち，それが z 方向に強く変化する．したがって力の z 方向の成分は以下のようになる．

$$F_z = \mu_z \left(\frac{\partial}{\partial z} B_z\right)\,. \tag{1.1.2}$$

次の図が実験の配置である．



銀の原子が炉から気化してスリットを通り，B_z が z 方向に強く変化する磁石の中心を通過していく．原子の持つ μ_z の値に応じて，磁場から受ける力で原子は上または下へと進路を変え，スクリーン上に到達する．高温のために銀の原子はもちろんすべての方向に一様に分布した磁気モーメント(m.m.) を持つ．つまり μ_z は μ から $-\mu$ の間に一様に分布する．したがってしばらくの間ビームが通った後では，スクリーン上での原子の分布は次のようになるであろう．



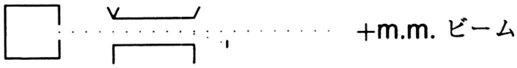
しかし，シュテルンとゲルラッハが見つけたものは以下の結果である．



原子は上か下に曲げられ，その間には何もないのである．これはあたかも炉から出た原子はすでに磁石の中の磁場の方向を感知し，それに応じて揃ったように思える．もちろんあなたがそれを信ずるなら私にはあなたのために何もできない．しかしそのようなことはあり得ない．したがって，私たちはこの結果を避けがたい現実として受け

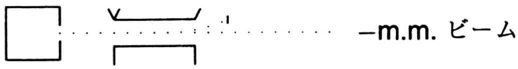
入れ，それと共生することを学ばなければならない．

まず初めに，シュテルン・ゲルラッハの実験を1本のビームを扱うとして，理想化されたものとしよう．以下において原子が上かまたは下に曲がる場合に応じて，+m.m. または −m.m. と呼ぼう．下向きに曲げられるビーム −m.m. を止めた場合は以下のように，



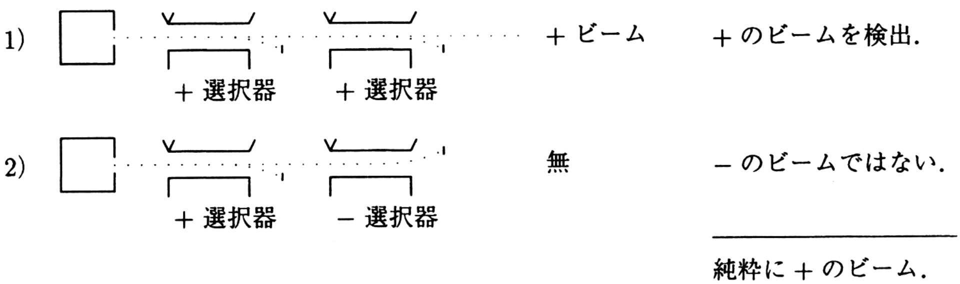
(1.1.3)

また上向きに曲げられたビーム +m.m. を止めた場合は以下のようになる．



(1.1.4)

ではどのようにして純粋な +m.m. ビーム，または −m.m. ビームを取り出したと確認できるのであろうか．以下のようにこれらの選択的な測定を繰り返してみよう．

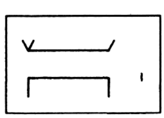


(1.1.5)

逐次測定 1) においては，+m.m. ビームを探しそれを見つけている．逐次測定 2) においては −m.m. ビームを探したが見出せない．これら両方で，最初の +m.m. 選択が，実際に +m.m. の原子を選択したことが確認される．同様の図が最初の選択が −m.m. の場合にも適用される．

1.2 観測記号

銀原子を用いたシュテルン・ゲルラッハの実験は，たまたま2個の値，つまり $+\mu$ と $-\mu$ しかとらない物理量 μ_z の測定であった．μ_z を可能な値として $a_1, a_2, \ldots, a_n$ をとるある物理量 A の一例と見なすことで，一般化していこう．$a_1, a_2, \ldots, a_n$ の中の特別な値を示すときは a' や a'' を使う．μ_z を測定し，ある結果(たとえば+m.m.)を選択する特定の装置を以下のように示した．



そこで一般的な装置を以下のように示そう．

$$\boxed{\begin{array}{c}\text{観測 } A\\ \text{選択 } a'\end{array}}$$

これらすべては，測定とは有限の空間(と時間)を要する物理的な行為であることを意味している．

記号として上記の箱で示すのはあまりにぎこちないので，以下のように簡単化しよう．

$$\boxed{\begin{array}{c}\text{観測 } A\\ \text{選択 } a'\end{array}} \longrightarrow |a'a'| \,. \tag{1.2.1}$$

この記法も測定行為に関係するのは有限の領域であるという意味を保持している．この記法では物理量が A であることをあからさまには表していないが，値 a' を使うことで十分に表現されている．しかしなぜ a' を繰り返して書いているのだろうか？ 第1に，一般化する方法を念頭においていること．そして第2に，選択的な測定とは(1.1.5)の逐次測定1)のように，初めの行為に確認という行為が伴うことを思い出させるためである．

ここで2組の特に簡単な測定行為を表す記号も導入しよう．1つは単位記号1で，何もしない，つまりすべてを偏見なく選択する．

$$\boxed{\begin{array}{c}\text{すべてを}\\ \text{受け入れる}\end{array}} \longrightarrow 1\,. \tag{1.2.2}$$

そしてもう1つはゼロ記号で，すべてを排除し何も受け入れないことを意味する．

$$\boxed{\begin{array}{c}\text{すべてを}\\ \text{排除する}\end{array}} \longrightarrow 0\,. \tag{1.2.3}$$

これらの記号に対する代数を構成する最初の段階は，時間を変えて行う逐次測定行為を，それぞれの記号の一連の積として表現することである．このようにして(1.1.5)の逐次測定1)の一般化，すなわち確認を伴う選択的な観測の繰り返しは以下のように表現される．

$$|a'a'||a'a'| = |a'a'|\,. \tag{1.2.4}$$

異なる選択をする2つの観測は何も選択しないという2)の一般化は以下のようになる．

$$a' \neq a'' : \qquad |a'a'||a''a''| = 0. \tag{1.2.5}$$

そして，観測記号1と0の積に関する自明な結果は

$$\begin{aligned} &\left|a'a'\right|1 = 1\left|a'a'\right| = \left|a'a'\right| , \\ &11 = 1 , \\ &10 = 01 = 0 \end{aligned} \tag{1.2.6}$$

および

$$\begin{aligned} &\left|a'a'\right|0 = 0\left|a'a'\right| = 0 , \\ &00 = 0 \end{aligned} \tag{1.2.7}$$

となる．

しばらくの間横道にそれて次の恒等式に注目しよう．

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{観測 } A \\ \text{選択 } a' \end{array}} \equiv \boxed{\begin{array}{l} \text{観測 } A - a' \\ \text{選択 } 0 \end{array}} . \tag{1.2.8}$$

では $(a' \neq a'')$ の場合，以下の意味するものは何であろうか？

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{観測 } (A - a')(A - a'') \\ \text{選択 } 0 \end{array}} ? \tag{1.2.9}$$

これは観測量 A の測定において，結果として a' または a'' を区別なく受け入れることである．これはより緩やかな選択測定で，対応する記号の和として表現しよう．

$$a' \neq a'' : \quad \boxed{\begin{array}{l} \text{観測 } (A - a')(A - a'') \\ \text{選択 } 0 \end{array}} \equiv \left|a'a'\right| + \left|a''a''\right| = \left|a''a''\right| + \left|a'a'\right| . \tag{1.2.10}$$

これは a' と a'' について，完全に対称である．同様にして次のようになり

$a' \neq a'' \neq a''' \neq a'$:

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{観測 } (A - a')(A - a'')(A - a''') \\ \text{選択 } 0 \end{array}} \equiv \left|a'a'\right| + \left|a''a''\right| + \left|a'''a'''\right| \tag{1.2.11}$$

最終的に以下の式を得る．

$$\boxed{\begin{array}{l} \text{観測 } (A - a_1)\cdots(A - a_n) \\ \text{選択 } 0 \end{array}} \equiv \left|a_1a_1\right| + \cdots + \left|a_na_n\right| = \sum_{a'}\left|a'a'\right| . \tag{1.2.12}$$

式(1.2.10)における $2! = 2$ 個の等価な和があるように，式(1.2.11)においては $3! = 6$ 個の等価な和の形があり，(1.2.12)においては $n!$ 個の等価な和がある．

すべての可能な観測結果を区別せずに受け入れる測定は 1 で表される．したがって (1.2.12) の和は単位記号 1 に等しくなければならない．

$$\sum_{a'} \left| a'a' \right| = 1 \,. \tag{1.2.13}$$

これが観測記号 $\left| a'a' \right|$ の**完全性**である．

先に進む前に，記号 0 の和に関する簡単な性質について見ておこう．何かを受け入れるかそれとも何も受け入れないかの選択の自由があれば，何かを受け入れるということなので以下の和の関係が成立する．

$$\begin{aligned} \left| a'a' \right| + 0 = 0 + \left| a'a' \right| &= \left| a'a' \right| \,, \\ 1 + 0 = 0 + 1 &= 1 \,, \\ 0 + 0 &= 0 \,. \end{aligned} \tag{1.2.14}$$

さて，それでは単位記号 1 として振る舞う $\sum_{a'} \left| a'a' \right|$ と $\left| a'a' \right|$ のすでに知られている性質は互いに矛盾しないのだろうか？ もし矛盾しないなら以下の関係式が成立しなければならない．

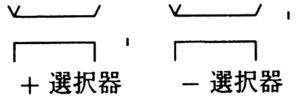
$$\left(\sum_{a'} \left| a'a' \right| \right) \left| a''a'' \right| = \left| a''a'' \right| \,. \tag{1.2.15}$$

これは和の積が，積の和（積の分配則）で与えられれば確かに成立している．

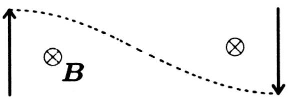
$$\begin{aligned} \left(\sum_{a'} \left| a'a' \right| \right) \left| a''a'' \right| &= \sum_{a'} \left| a'a' \right| \left| a''a'' \right| \\ &= \left| a''a'' \right| \left| a''a'' \right| + \sum_{a'(\neq a'')} \left| a'a' \right| \left| a''a'' \right| \\ &= \left| a''a'' \right| + 0 + \cdots + 0 = \left| a''a'' \right| \,. \end{aligned} \tag{1.2.16}$$

したがって積の分配則を受け入れることにする．

2 個の文字を書いた記号 $\left| a'a' \right|$ は，$\left| a'a'' \right|, a' \neq a''$ の場合への一般化のためである．ではこれは何を意味するのだろうか？ 式 (1.1.5) の磁気モーメントの例 2) に返ってみよう．



図で示されているように，これはすべてを止めてしまう．しかし，もし + の選択器と − の選択器の間で磁気モーメントの方向を反転させたらどうだろう？ 反転は下図のように一様な磁場を使って，磁場方向の周りで双極子を歳差運動させることで可能である．



ただし磁場中での時間を制御することが必要となる．この結果は，+m.m. が入って −m.m. のみが出て行くという選択測定 $\left|+-\right|$ となる．このような一般的な逐次測定について以下の式が成立する．

$$\left|a'a''\right|\left|a''a'''\right| = \left|a'a'''\right| \tag{1.2.17}$$

$$\left|a'a''\right|\left|a'''a^{\text{iv}}\right| = 0 \qquad (a'' \neq a''') \,. \tag{1.2.18}$$

ここでもまた単位記号 1 は以下のように正しい振る舞いをしている．

$$\left(\sum_{a'}\left|a'a'\right|\right)\left|a''a'''\right| = \sum_{a'}\left|a'a'\right|\left|a''a'''\right| = \left|a''a''\right|\left|a''a'''\right| + 0 + \cdots \qquad = \left|a''a'''\right| \,. \tag{1.2.19}$$

さて以下の事実に注目しよう．

$$\begin{aligned} \left|a'a''\right|\left|a''a'\right| &= \left|a'a'\right| \,, \\ \left|a''a'\right|\left|a'a''\right| &= \left|a''a''\right| \,. \end{aligned} \tag{1.2.20}$$

左辺は積の順序が異なるだけだが，右辺はもし $a' \neq a''$ ならば，まったく異なる．つまり積の順序が重要となるのである．ここで展開している代数は積に関して非可換である．また，すでに気付いたように，この代数は除法代数ではない．すなわち

$$a' \neq a'' : \qquad \left|a'a'\right|\left|a''a''\right| = 0 \tag{1.2.21}$$

であることは $\left|a'a'\right|$ または $\left|a''a''\right|$ が 0 であることを意味しない．同様に

$$a' \neq a'' : \qquad \left|a'a''\right|\left|a'a''\right| = 0 \tag{1.2.22}$$

は $\left|a'a''\right|$ が 0 であることを意味するわけでない．

2 個の観測記号 X と Y の**交換子**

$$[X, Y] \equiv XY - YX \tag{1.2.23}$$

は，積の順序が問題でなければゼロである．しかし積の順序が問題ならば $[X, Y] \neq 0$ である．また類似の量として以下で定義される**反交換子** $\{X, Y\}$ がある．

$$\{X, Y\} \equiv XY + YX \,. \tag{1.2.24}$$

これはもし $[X, Y] = 0$ ならば $2XY$ または $2YX$ に等しい．そうでなければ演算子 X と Y の対称化された積 $\frac{1}{2}\{X, Y\}$ と見なせる．これらの交換子の定義の直接的な結果

として以下の恒等式が成り立つ.

$$XY = \tfrac{1}{2}\{X,Y\} + \tfrac{1}{2}[X,Y]\,. \tag{1.2.25}$$

観測の結果は数値である．ここでの代数として，抽象的な観測記号と同様に数値も導入する必要がある．数値としての1と0の以下の定義は明白であろう.

$$\underset{\text{数値}}{1}\;\big|a'a''\big| = \big|a'a''\big|\,, \qquad \underset{\text{数値}}{0}\;\big|a'a''\big| = \underset{\text{記号}}{0}\,. \tag{1.2.26}$$

これらは以下のように積をまとめて表現するのに便利である.

$$\big|a'a''\big|\big|a'''a^{\prime\mathrm{V}}\big| = \left\{\begin{array}{rl} \big|a'a^{\prime\mathrm{V}}\big| = 1\,\big|a'a^{\prime\mathrm{V}}\big| & (a'' = a''') \\ 0 = 0\,\big|a'a^{\prime\mathrm{V}}\big| & (a'' \neq a''') \end{array}\right\}$$

$$= \delta(a'', a''')\big|a'a^{\prime\mathrm{V}}\big|\,. \tag{1.2.27}$$

ここで

$$\delta(a'', a''') = \begin{cases} 1 & (a'' = a''')\,, \\ 0 & (a'' \neq a''') \end{cases} \tag{1.2.28}$$

はクロネッカー*のデルタ記号である.

さて，以下のことにも注意しておこう．$\big|a'a''\big| + \big|a'a''\big|$ はどんな意味を持つのだろうか？ もし分配則を一般的に受け入れるならば，以下のようになる.

$$1\big|a'a''\big| + 1\big|a'a''\big| = (1+1)\big|a'a''\big|\,. \tag{1.2.29}$$

ここで1足す1は？ もちろん2である.

$$1\big|a'a''\big| + 1\big|a'a''\big| = 2\big|a'a''\big|\,. \tag{1.2.30}$$

1.3　状態ベクトル

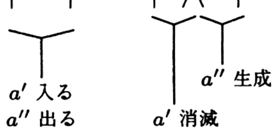
ここでもう少し詳しく $\big|a'a''\big|$ の意味について考えてみよう．観測量 A に対して値 a' を持つ原子(これを簡単のために a' 原子と呼ぼう)だけが入射してくることができる(左から右へ読むとする．必要なら L → R と記す)．そして残されるのは a'' 原子である．これはあたかも入射してきた a' 原子が消滅し，そこに a'' 原子が生成したとい

*Leopold Kronecker (1823–1891)

うことである．これは実際とは区別ができない思考的な 2 段階過程である．この複合的な見方をブラケット (⟨⟩) を導入して表現しよう．

$$\left|a'a''\right| \quad \equiv \quad \left|a'\right\rangle\left\langle a''\right| .$$

[L → R] (1.3.1)



これだけでは特別面白いことではない．そこでこれを新しい型の記号の積と見なすことで大きく進展させてみよう．しかしこのことはすでに知られている観測記号 $\left|a'a''\right|$ の代数的な性質と矛盾しないだろうか？ まず，以下の式が成立しなければならない．

$$\left|a'\right\rangle \underbrace{\left\langle a''\right|\left|a'''\right\rangle}_{=\left\langle a''\middle|a'''\right\rangle} \left\langle a^{\mathrm{iv}}\right| = \delta(a'', a''')\left|a'\right\rangle\left\langle a^{\mathrm{iv}}\right| . \tag{1.3.2}$$

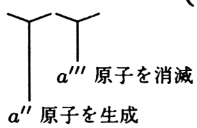
ここで積 $\left\langle a''\right|\left|a'''\right\rangle$ と書く代わりに $\left\langle a''\middle|a'''\right\rangle$ と書いて記法を簡単化した．今後もこの種類の積についてはこのように記す．式(1.3.2)は，以下の関係があれば成立している．

$$\left\langle a''\middle|a'''\right\rangle = \delta\left(a'', a'''\right) . \tag{1.3.3}$$

以上は次のような物理的な意味と一致していることに注意しよう．もしこの生成・消滅の行為が孤立して考慮されるなら，次のようになる．

$$\left\langle a''\middle|a'''\right\rangle \quad = \quad \begin{cases} a'' = a''' : & \text{数値 } 1 \\ a'' \neq a''' : & \text{数値 } 0 \end{cases}$$

[L → R] (1.3.4)



つまり，a'' 原子 ($a'' \neq a'''$) しか存在しない状況では a''' 原子の消滅は不可能である．

導入された n 個の記号 $\left\langle a'\right|$ と n 個の記号 $\left|a'\right\rangle$ は，同じ場合は積 $\langle \quad | \quad \rangle$ が 1 となり，異なる場合には 0 となる．

このような性質を持つものにはよく知られた種々のものがあり，最も明らかなのは，空間座標系の単位ベクトル $\boldsymbol{i}, \boldsymbol{j}, \boldsymbol{k}$，つまり，より一般的に書くと $\boldsymbol{e}_k$, $k = 1, 2, 3$ がある．実際，

$$\boldsymbol{e}_k \cdot \boldsymbol{e}_l = \left\{ \begin{array}{ll} 1 & (k = l) \\ 0 & (k \neq l) \end{array} \right\} = \delta(k, l) \equiv \delta_{kl} \tag{1.3.5}$$

は正規化された直交ベクトルを特徴付ける．この正規直交性の性質に加えて，ダイアディック積の和で表した完全性が成り立つ．

$$\sum_k \boldsymbol{e}_k \boldsymbol{e}_k = 1 \,. \tag{1.3.6}$$

したがって，これらの記号 $\langle a'|$ と $|a'\rangle$ をベクトル，つまり n 成分を持つベクトルと呼ぼう．しかし数値を値とする積(スカラー積)

$$\langle a'|a''\rangle = \delta(a', a'') \tag{1.3.7}$$

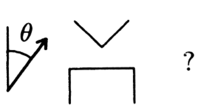
は異なる2個の型のベクトルの積であることに注意しよう．確かに $\langle a'|$ は生成作用を表し，消滅作用(L → R へと読む)を表す $|a'\rangle$ とは異なる．これらのベクトルが存在する幾何学的空間はユークリッド*空間よりは幾分一般的なものでなければならない．スカラー積での位置から，$\langle a'|$ を左ベクトル，そして $|a'\rangle$ を右ベクトルと呼ぼう．ディラック(Dirac)†は $\langle a'|a''\rangle$ をブラケットと呼び，それぞれをブラベクトルおよびケットベクトルと呼んだ．

1.4 逐次観測と確率

z 方向の磁気モーメントの測定，つまり観測量 A の測定は数多くの可能な観測量 $B, C, \ldots$ のほんの1つにすぎない．磁気モーメントの例においても，あらゆる方向の観測が可能であることからも明らかであろう．

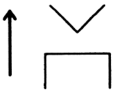


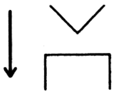
回転した装置においても，回転された磁場の方向にしたがい，原子は上または下に曲げられる．これだけを考えるならば，この実験はもとの実験とまったく同じである．しかし下図のように，ある装置を通過したビームが別の装置に入射してきた場合はどうなるだろうか？



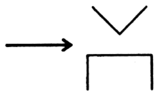
すでに結果を知っている場合が2通りある．1つは角度 θ が $0°$ でもう1つは $180°$ の場合である．

*Euclid of Alexandria (fl. B.C. 300) †Paul Adrien Maurice Dirac (1902–1984)

$\theta = 0°$  ビーム中の原子はすべて +m.m. であり，通ったビームはすべて上に曲げられる．

$\theta = 180°$  ビーム中の原子はすべて −m.m. であり，通ったビームはすべて下に曲げられる．

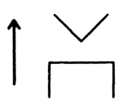
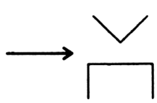
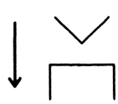
それでは以下の場合はどうなるだろうか？

$\theta = 90°$  ？

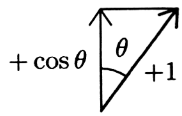
そのためには，最初の装置をゆっくりと $\theta = 0°$ から $\theta = 180°$ へ回転したと思えばよい．そうすれば，通過したビームすべてが上方向に行き下には行かない最初の状況から，しだいに変化して，上方向が減少し下方向が増加していって最後は 180° となり，すべてが下方向に曲げられることになる．このことより $\theta = 90°$，つまり 0° と 180° の真ん中では原子の半数が上向きのビーム (+m.m.) で，あとの半分が下向きのビーム (−m.m.) であることは明らかであろう．

では，個々の原子はどうなのだろうか？ もちろん原子が半分に分裂する訳ではない．ある原子は上に曲げられ，また別の原子は下に曲げられるのである．個々の原子がどう振る舞うかを予言したり，制御することはできない．数多くの原子に対して平均的に何が起こるかが言えるだけである．

では，ここで次の 3 通りの場合に，通過したビームの磁気モーメントの平均について μ を単位にとって列挙してみよう．

			平均
$\theta = 0°$		すべて +m.m.	+1
$\theta = 90°$		50% +m.m., 50% −m.m.	0
$\theta = 180°$		すべて −m.m.	−1

これより任意の角度 θ に対するもっともらしい結果を得られるだろうか？ 最初に観測された θ 方向の磁気モーメントは z 方向と，それに垂直な成分に分解できる．



z 方向の観測された平均の磁気モーメントは，θ 方向の磁気モーメントの z 方向への射影と仮定するのがごく自然であろう．それは $\cos\theta$ であり，確かに $\theta = 0°, 90°, 180°$ での値を正しく再現している．

平均の磁気モーメントとは，2通りの可能な値 $+1, -1$ に上向きまたは下向きビームの原子の数(**十分多くの数**)の割合に応じた重みを掛けて得られる平均である．十分に多くの数の原子に対する割合という意味で使われた場合，その割合をそれぞれの結果に対応する確率として論じていることになる．したがって最初の選択が角度 θ 方向に対して +m.m. であった場合は

$$[\mathrm{L} \to \mathrm{R}] \qquad \cos\theta = (+1)p(+,+) + (-1)p(+,-) \tag{1.4.1}$$

および

$$[\mathrm{L} \to \mathrm{R}] \qquad 1 = p(+,+) + p(+,-) \tag{1.4.2}$$

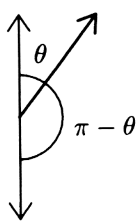
となる．したがって確率は以下のようになる．

$$\begin{aligned} p(+,+) &= \frac{1+\cos\theta}{2} = \cos^2(\tfrac{1}{2}\theta)\ , \\ p(+,-) &= \frac{1-\cos\theta}{2} = \sin^2(\tfrac{1}{2}\theta)\ . \end{aligned} \tag{1.4.3}$$

ここで三角関数の以下の恒等式を使った．

$$\begin{aligned} \cos\theta = \cos\left(\tfrac{1}{2}\theta + \tfrac{1}{2}\theta\right) &= \cos^2(\tfrac{1}{2}\theta) - \sin^2(\tfrac{1}{2}\theta) \\ &= 2\cos^2(\tfrac{1}{2}\theta) - 1 \\ &= 1 - 2\sin^2(\tfrac{1}{2}\theta)\ . \end{aligned} \tag{1.4.4}$$

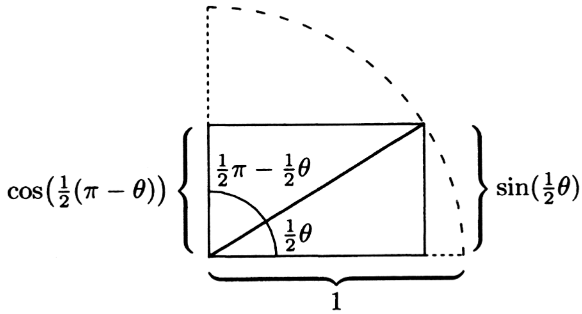
ここで式(1.4.3)での2個の確率は以下のような関係であることに注意しよう．



つまり $-$ の結果となる確率は角度が $\pi - \theta$ における $+$ の結果となる確率と同じである．

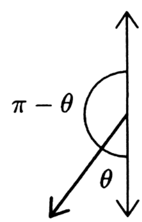
$$\cos^2\left(\tfrac{1}{2}(\pi - \theta)\right) = \sin^2(\tfrac{1}{2}\theta)\ . \tag{1.4.5}$$

以下の図より幾何学的な意味がわかるであろう．



このことに注意すれば，最初が $-$m.m. である場合の確率を直ちに次のように書くことができる．

$$[\mathrm{L} \to \mathrm{R}] \quad \begin{aligned} p(-,+) &= \cos^2\bigl(\tfrac{1}{2}(\pi-\theta)\bigr) = \sin^2(\tfrac{1}{2}\theta)\ ; \\ p(-,-) &= \sin^2\bigl(\tfrac{1}{2}(\pi-\theta)\bigr) = \cos^2(\tfrac{1}{2}\theta)\ . \end{aligned} \tag{1.4.6}$$



以下の表に 4 通りの場合の確率を載せておく．

$p(\ ,\ )$	$+$	$-$
$+$	$\cos^2(\frac{1}{2}\theta)$	$\sin^2(\frac{1}{2}\theta)$
$-$	$\sin^2(\frac{1}{2}\theta)$	$\cos^2(\frac{1}{2}\theta)$

1.5　確率振幅と干渉

さて，ここではより一般的な議論を行う．まず最初に，ある量 A の測定をし，ある結果 a' を得たとする．これを a' 原子の生成とし，記号 $\langle a'|$ で表す（L → R で読む）．次にまだ特定されていないある量 B の測定を行い，これを $M(B)$ という記号で書くと状態は $\langle a'|M(B)$ となる．そして最後のステップとして，$|a'\rangle$ を右に掛けると以下の数値を得る．

$$[\mathrm{L} \to \mathrm{R}] \qquad p\bigl(a', M(B)\bigr) = \langle a'|M(B)|a'\rangle\ . \tag{1.5.1}$$

さてここで $M(B)$ として，次の 3 通りの場合について考えてみよう．

1. B の測定として b' だけを選択する測定：

$$M(B) = |b'\rangle\langle b'| ,$$

$$\left[p(a', |b'b'|) =\right] \quad p(a',b') = \langle a'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle . \tag{1.5.2}$$

2. B の測定として b' または b'', $b'' \neq b'$ を選択する測定：

$$M(B) = |b'\rangle\langle b'| + |b''\rangle\langle b''| ,$$

$$\begin{aligned} p(a', b' \text{ or } b'') &= \langle a'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle + \langle a'|b''\rangle\langle b''|a'\rangle \\ &= p(a',b') + p(a',b'') . \end{aligned} \tag{1.5.3}$$

3. B の測定としてすべての b' を区別なく選択する測定：

$$\begin{aligned} M(B) &= \sum_{b'} |b'\rangle\langle b'| = 1 , \\ p(a',1) &= \sum_{b'} \langle a'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle = \langle a'|1|a'\rangle \\ &= \sum_{b'} p(a',b') = 1 . \end{aligned} \tag{1.5.4}$$

以上の関係により，$p(a',b')$ が，a' 原子に対して B を測定したら b' になる確率であると見なせるという性質を持つ．なぜなら，b' または b'' を選択する，つまり通過したビームの中には b' および b'' の原子が存在するという測定は，$p(a',b') + p(a',b'')$ というより大きい確率を持ち，また何も特定しない測定の結果は確率の最大値である 1 になる，つまり $\sum_{b'} p(a',b') = 1$ であるからである．

1 つの簡単な場合について確率の公式を確めることもできる．それは B が A の場合，つまり $\theta = 0$ のときの 2 通りの磁気モーメント，または $\theta = 180°$ のときの 2 通りの磁気モーメントである．ここで $b' = a''$ とすると，

$$p(a',a'') = \left\{ \begin{array}{ll} 1 & (a' = a'') \\ 0 & (a' \neq a'') \end{array} \right\} = \delta(a',a'') \tag{1.5.5}$$

であり，確かに以下の関係が成立する．

$$\langle a'|a''\rangle\langle a''|a'\rangle = [\delta(a',a'')]^2 = \delta(a',a'') . \tag{1.5.6}$$

以上の結果や $\cos^2(\frac{1}{2}\theta)$ となることからわかるように，確率は 0 と 1 の間の数である．それでは $\langle a'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle$ がこの範囲にあり，負の数や複素数でないためには，$\langle a'|b'\rangle$ はどのような数なのだろうか？

2 通りの可能性がある．

1. $\langle a'|b'\rangle$ が実数であり，そして $\langle b'|a'\rangle = \langle a'|b'\rangle$ である．すると

$$p(a',b') = \left[\langle a'|b'\rangle\right]^2 \geq 0 \tag{1.5.7}$$

であり，すべての負でない数の和が 1 となることから $p(a',b') \leq 1$ は自動的に満たされる．しかしこれに対する反論は，次の

$$\langle b'|a'\rangle = \langle a'|b'\rangle \tag{1.5.8}$$

という関係は，物理的には異なるにもかかわらず，左と右のベクトルが同じであると言っているように見えることから出てくる．実際，2 乗して -1 となる数がない実数だけの体系ではうまくいかないことを後で具体的に示すことにする．

2. $\langle a'|b'\rangle$ は複素数であり，$\langle b'|a'\rangle$ はそれの複素共役，つまり $\langle b'|a'\rangle = \langle a'|b'\rangle^*$ である．すると次のようになる．

$$p(a',b') = \left|\langle a'|b'\rangle\right|^2 \geq 0\,. \tag{1.5.9}$$

ここで左と右のベクトルは同じではないが，複素共役を含む操作で内的に変換(これについては後で詳細に述べる)されている．ベクトルが 2 種類あることによる 2 重性は，複素数の持つ 2 重性に完全に合うので，複素数を受け入れよう．

絶対値の 2 乗で確率を記述することから，複素数 $\langle a'|b'\rangle$ を**確率振幅**と呼ぶ．正の実数である確率を複素数の確率振幅から導くのは単に機能的な記述である．しかしこの関係は，以下で展開する類推も呼び起こす．

(一般的に異なる) 3 個の物理量 A, B, C の一連の観測について考えよう．まず最初に，A を測定し結果 a' を得る，つまり a' 原子を生成する．これを $\langle a'|$ (L → R と読む) と記す．次にこの時点では特定されていない B の測定を行い，$M(B)$ と記号化する．最後に C の測定を行い結果 c' を得て，それを c' 原子の消滅と記述する．この逐次測定により得られる数は確率振幅 $\langle a'|M(B)|c'\rangle$ であり，この複合的観測結果となる確率は

[L → R]
$$p(a',M(B),c') = \left|\langle a'|M(B)|c'\rangle\right|^2 \tag{1.5.10}$$

で与えられる．

3 通りの例について考えよう．

1. $M(B) = |b'\rangle\langle b'|$，つまり 1 つの状態を選択する測定：

$$\left[p(a',|b'b'|,c') = \right] \quad p(a',b',c') = \left|\langle a'|b'\rangle\langle b'|c'\rangle\right|^2 = p(a',b')p(b',c')\,. \tag{1.5.11}$$

これは当然の結果である．a' 原子のビームは，選択測定により割合 $p(a',b')$ の原

子だけ残る．そしてこれらの原子は次の選択で確率として $p(b',c')$ だけ残り，結果として積 $p(a',b')p(b',c')$ で与えられる確率で選択される．

2. $M(B)=\sum_{b'}|b'\rangle\langle b'|=1$，すべてを区別なく受け入れる，つまり何も観測しない場合：このときは $\langle a'|1|c'\rangle$ は以下のようにも書け

$$\langle a'|c'\rangle=\sum_{b'}\langle a'|b'\rangle\langle b'|c'\rangle\ , \tag{1.5.12}$$

当然の結果

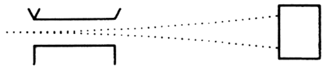
$$p(a',1,c')=p(a',c') \tag{1.5.13}$$

を得る．ところで式(1.5.12)は，スカラー積をある座標系の成分で求めるよく知られた以下の3次元ベクトルの関係式に対応するものである．

$$\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{C}=\sum_k A_k C_k=\sum_k \boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{e}_k\,\boldsymbol{e}_k\cdot\boldsymbol{C}\ . \tag{1.5.14}$$

ここで式(1.3.6)の完全性が使われていることに注意しよう．

3. 非選択的な B の測定:B の測定器は作動するが b' 原子の選択は行わない．磁気モーメントの例では，上向きと下向きのビームは物理的に選び出されるが，これらのビームは測定された後でともに次の測定器へと飛んでいく．



この結果の確率 $p(a',b,c')$ は，実験によって物理的に区別された独立な選択 b' の和で与えられる．

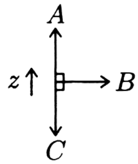
$$p(a',b,c')=\sum_{b'}p(a',b')p(b',c')\ . \tag{1.5.15}$$

すべてを受け入れる B 測定の場合も，非選択的な B 測定の場合も，中間の段階で原子を1度も排除しない．したがって，あらゆる結果に対する割合，つまり全体の確率は，ともに1に等しい．

$$\begin{aligned}\sum_{c'}p(a',1,c')&=\sum_{c'}p(a',c')=1\ ,\\ \sum_{c'}p(a',b,c')&=\underbrace{\sum_{b'}p(a',b')}_{=1}\ \underbrace{\sum_{c'}p(b',c')}_{=1}=1\ .\end{aligned} \tag{1.5.16}$$

しかし，一般に個々の結果に対しては $p(a',1,c')\neq p(a',b,c')$ である．

例として A,B,C を3方向での磁気モーメントの測定であると考えてみよう．



90° に対する確率はすべて $\frac{1}{2}$ なので，以下のようになる（L → R で読む）．

$$
\begin{aligned}
p(\overset{a}{+}, b, \overset{c}{+}) &= p(\overset{a}{+}, \overset{b}{+})p(\overset{b}{+}, \overset{c}{+}) + p(\overset{a}{+}, \overset{b}{-})p(\overset{b}{-}, \overset{c}{+}) = \frac{1}{2}\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\frac{1}{2} = \boldsymbol{\frac{1}{2}} , \\
p(+, b, -) &= p(+, +)p(+, -) + p(+, -)p(-, -) = \frac{1}{2}\frac{1}{2} + \frac{1}{2}\frac{1}{2} = \boldsymbol{\frac{1}{2}} .
\end{aligned}
\tag{1.5.17}
$$

しかしながら，z 方向で + である磁気モーメントは，明らかに $-z$ 方向では + ではないので，以下のようになる．

$$
p(\overset{a}{+}, 1, \overset{c}{+}) = p(\overset{a}{+}, \overset{c}{+}) = 0 . \tag{1.5.18}
$$

そして $-z$ 方向に対して − の値は $+z$ 方向では + なので，以下のようになる．

$$
p(\overset{a}{+}, 1, \overset{c}{-}) = p(\overset{a}{+}, \overset{c}{-}) = 1 . \tag{1.5.19}
$$

これらの確率を加えれば 1 になっている．

なぜこのような差が必然的に出てきたのかを見るために，$p(+, 1, \pm)$ を詳しく見てみよう．

$$
[\mathrm{L} \rightarrow \mathrm{R}] \qquad
\begin{aligned}
p(\overset{a}{+}, 1, \overset{c}{+}) &= \left| \langle \overset{a}{+} | \overset{b}{+} \rangle \langle \overset{b}{+} | \overset{c}{+} \rangle + \langle \overset{a}{+} | \overset{b}{-} \rangle \langle \overset{b}{-} | \overset{c}{+} \rangle \right|^2 , \\
p(\overset{a}{+}, 1, \overset{c}{-}) &= \left| \langle \overset{a}{+} | \overset{b}{+} \rangle \langle \overset{b}{+} | \overset{c}{-} \rangle + \langle \overset{a}{+} | \overset{b}{-} \rangle \langle \overset{b}{-} | \overset{c}{-} \rangle \right|^2 .
\end{aligned}
\tag{1.5.20}
$$

各項の 2 乗は $\frac{1}{2}\frac{1}{2} = \frac{1}{4}$ で，**それだけを残すと非選択的測定の結果となることに注意しよう．**したがって，確率振幅の積は，各々**大きさは** $\frac{1}{2}$ である．だから $p(+, 1, -)$ においては，これら 2 項は**足されなければ**ならない（後できちんと示す）．

$$
p(+, 1, -) = \left| \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \right|^2 = 1 . \tag{1.5.21}
$$

しかるに $p(+, 1, +)$ においては 2 項は**引き算**となる．

$$
p(+, 1, +) = \left| \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \right|^2 = 0 . \tag{1.5.22}
$$

要約すると，これは典型的な波の現象である強め合う場合と打ち消し合う場合の**干渉**が起こっている状況なのである．この**類似性**より，確率振幅を波動関数と言ってもよい．

1.6 観測が系を乱す

用語は別として，以下の事実からは重要な教訓がある．実際に B の測定を行わない確率 $p(a',1,c')$

$$p(a',1,c') = \left|\sum_{b'} \langle a'|b'\rangle\langle b'|c'\rangle\right|^2 \tag{1.6.1}$$

は，一般的には，B を非選択的に観測を行う場合，つまりすべての状態の原子を受け入れる場合の確率 $p(a',b,c')$

$$p(a',b,c') = \sum_{b'} \left|\langle a'|b'\rangle\langle b'|c'\rangle\right|^2 \tag{1.6.2}$$

とは異なる．この事実は通常「観測が系を乱す」と表現される．このことは，原則として，理想的な極限では観測はその系を乱さないと仮定される古典力学での状況とはまったく異なることである．ある位置での電場を測定するというよく知られた問題について考えよう．それに対して，その位置に試験用の電荷(それ自体理想化されたものである)を置いて，それに働く力を測定する．試験用の電荷を置くことで測定しようとしている電場が変わるのではないかという反論に対しては，通常は「確かにそうですが，試験用の電荷の大きさをいくらでも小さくできます」と答える．原子やその中の電子にまで達し，それ以上の小さな電荷は存在しない(最近の推測は別として)ということが発見されるまでは，この答えで十分であった．要約すると，物質のそしてそれに付随する物理的性質の原子性が，古典力学では暗黙のうちに仮定していた基本的な理想化ということに対する根本的な制限を課すのである．そして，結局量子力学とはそういう原子性を扱うものなのである．

非選択的な B の観測の記号 M_b が

$$\sum_{b'} \left|\langle a'|b'\rangle\langle b'|c'\rangle\right|^2 = \left|\langle a'|M_b|c'\rangle\right|^2 \tag{1.6.3}$$

から決まることから，ある意味では「観測は系を乱す」ということの定量的な説明を得る．このことは $p(a',1,c')$ に返って，以下のように書いてみるとよくわかる．

$$\begin{aligned} p(a',1,c') &= \sum_{b'} \langle a'|b'\rangle^* \langle b'|c'\rangle^* \sum_{b''} \langle a'|b''\rangle\langle b''|c'\rangle \\ &= \underbrace{\sum_{b'} \left|\langle a'|b'\rangle\langle b'|c'\rangle\right|^2}_{=p(a',b,c')} + \sum_{b'\neq b''} \langle a'|b'\rangle^* \langle b'|c'\rangle^* \langle a'|b''\rangle\langle b''|c'\rangle\,. \end{aligned} \tag{1.6.4}$$

例で見たように，$p(a',b,c')$ は上記の $p(a',1,c')$ において2乗の項だけを残し $b' \neq b''$ である交叉積を落とすことで得られる．このことを以下のようにして表すことができる．

$$M_b = \sum_{b'} |b'\rangle\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi(b')} \langle b'|\,. \tag{1.6.5}$$

ここで $\varphi(b')$ は実数の位相である（これについては，後で詳しく述べる）．この位相の影響は上記の式を代入することで与えられる．

$$\langle a'|b''\rangle\langle b''|c'\rangle \longrightarrow \langle a'|b''\rangle\, e^{i\varphi(b'')}\langle b''|c'\rangle\,,$$
$$\langle a'|b'\rangle^*\langle b'|c'\rangle^* \longrightarrow \langle a'|b'\rangle^*\, e^{-i\varphi(b')}\langle b'|c'\rangle^*\,. \tag{1.6.6}$$

つまり $b''=b'$ に対しては何の変更もないが，

$$e^{-i\varphi(b')}\,e^{i\varphi(b')} = \left|e^{i\varphi(b')}\right|^2 = 1\,, \tag{1.6.7}$$

一方 $b''\neq b'$ の項に対しては以下の因子がかかる．

$$e^{-i\varphi(b')}\,e^{i\varphi(b'')}\,. \tag{1.6.8}$$

もし各位相 $\varphi(b')$ がある決まった値ではなくむしろランダムに分布する値ならば，ある値 φ と $\varphi+\pi$ は同じように現れ，平均するとゼロなので（$e^{i\pi}=-1$），交叉項を除くことができる．ある測定によって引き起こされる乱れを制御できないという性質を表すのは，この位相のランダム性なのである．この点は重要である．なぜなら高レベルの古典的な観測では，測定によって起こる乱れが何であるかがわかっていれば，補正することができるので乱れは許容できるからである．

以下の式は，もし位相 $\varphi(b'')$ に虚数を仮定することを許せば，より広範囲に適用できる．

$$\sum_{b''}|b''\rangle\, e^{i\varphi(b'')}\langle b''|\,. \tag{1.6.9}$$

特に正の無限大の虚数 $i\infty$ の場合は以下のようになる．

$$e^{i(i\infty)} = e^{-\infty} = 0\,. \tag{1.6.10}$$

もしこれをすべての $b''\neq b'$ である b'' に適用すると，それらの項はすべて消えて以下の項だけが残る（$\varphi(b')$ は実数）．

$$M = e^{i\varphi(b')}|b'b'|\,. \tag{1.6.11}$$

ここで残る位相は確率 $|\langle a'|M|c'\rangle|^2$ においては無視できる．これは b' 原子だけを選択し，他のものを捨ててしまう実験であり，他のビームを止めてしまうということは完全吸収（$e^{-\infty}$）により記述される．この議論の拡張はすぐにできる．もし無限大の虚数の位相を b' と $b''\neq b'$ 以外のすべてに付け，これら 2 個に対して実数の位相を付け $\varphi(b')=\varphi(b'')$ に限ると，$|b'b'|+|b''b''|$ の観測を生成できる．そして，最終的にもしすべてに対して位相 $\varphi(b')$ が実数で，かつ同じ値で固定すればすべてを受け入れる観測 $M(B)=1$ を得る．

1.7 観測量

観測を記号で表現して確率を用いるのは，物理的な性質を数値で表して理論が組み立てられている古典的な物理学とは大いに異なる．しかし物理的な性質に対する数値は量子論的な記述においても潜在しているはずである．全体としての物理的性質を記述する記号を見出せるのだろうか？

自然な出発点は，a' 原子の観測で得られる物理量 B の平均の値，つまり期待値である．これは次の式で与えられる．

[L → R]

$$\langle B\rangle_{a'} = \sum_{b'} \underbrace{p(a',b')}_{=\langle a'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle} b' = \langle a'|\left(\sum_{b'}|b'\rangle b'\langle b'|\right)|a'\rangle\,. \tag{1.7.1}$$

この式は何が測定されるかという部分

$$B = \sum_{b'}|b'\rangle b'\langle b'| \tag{1.7.2}$$

と原子の情報 $\langle a'|$，$|a'\rangle$ にはっきりと分離され，

$$\langle B\rangle_{a'} = \langle a'|B|a'\rangle \tag{1.7.3}$$

と表される．

物理量 B の記号として上記の B が適当かどうか調べてみる．まず次の式を見てみよう．

$$\langle b'|B = \sum_{b''} \underbrace{\langle b'|b''\rangle}_{=\delta(b',b'')} b''\langle b''| = b'\langle b'|\,. \tag{1.7.4}$$

これは b'' の和が，$b''=b'$ 以外は消えたためである．この結果は左から右(L → R)に読んで，b' 原子を生成しその物理量 B を測定すると結果は数値 b' であるということである．あるいは代わりに以下のようにも書ける．

$$B|b''\rangle = \sum_{b'}|b'\rangle b' \underbrace{\langle b'|b''\rangle}_{=\delta(b',b'')} = |b''\rangle b''\,. \tag{1.7.5}$$

これらの結果を別の形で表現してもよいだろう．ある値 b' を単位記号に掛け B から引いた $B-b'1$ について考えよう．

$$\begin{aligned} B-b'1 &= \sum_{b''}|b''\rangle b''\langle b''| - b'\sum_{b''}|b''\rangle\langle b''| \\ &= \sum_{b''}|b''\rangle(b''-b')\langle b''|\,. \end{aligned} \tag{1.7.6}$$

すると $b''=b'$ に対して $b''-b'=0$ だから以下の式を得る．

$$\langle b'|(B-b')=0, \qquad (B-b')|b'\rangle=0\,. \tag{1.7.7}$$

ここで単位記号は自明なので省略した．

記号 B について非常に基本的な性質がある．B の測定の結果が $b_1, b_2, \ldots, b_n$ であるとすると，B^2 の測定の結果は $(b_1)^2, (b_2)^2, \ldots, (b_n)^2$ でなければならないし，同様に高次のベキについても同じことが言える．実際

$$B^2 = B\sum_{b'}|b'\rangle b'\langle b'| = \sum_{b'}|b'\rangle (b')^2\langle b'| \tag{1.7.8}$$

となり，高次の項も同様になる．同じようにして以下の量を考えると，

$$B-b_1 = \sum_{b'}|b'\rangle(b'-b_1)\langle b'| \tag{1.7.9}$$

となり，次のようになる．

$$(B-b_1)(B-b_2) = \sum_{b'}|b'\rangle(b'-b_1)(b'-b_2)\langle b'|\,. \tag{1.7.10}$$

これを n 回続けていくと，どの b' であれ b'_k のどれかに一致するので，次の結果を得る．

$$\begin{aligned}(B-b_1)\cdots(B-b_n) &= \prod_{k=1}^{n}(B-b_k)\\ &= \sum_{b'}|b'\rangle\left[\prod_{k=1}^{n}(b'-b_k)\right]\langle b'| = 0\,.\end{aligned} \tag{1.7.11}$$

したがって B は n 次の代数方程式にしたがう．これより B の多項式で表される任意の関数は $1, B, B^2, \ldots B^{n-1}$ の線形結合となる．このようにして次のように書ける．

$$f(B) = \sum_{b'} f(b')|b'b'| = \sum_{b'}|b'\rangle f(b')\langle b'|\,. \tag{1.7.12}$$

これは観測記号 B，つまり物理量 B の関数 $f(B)$ の一般的な定義と見なせる．B で表される物理量の観測は B のすべての関数を観測する．数値の関数である $f(b')$ に要求されるのは，それぞれの起こり得る観測結果 b' についてきちんと定義された値を持つことである．

$n-1$ 次の多項式で表される B の関数の例として，$n-1$ 個の 1 次式の積である次の関数を考えよう．

$$\delta(B,b') = \prod_{b''(\neq b')}\left(\frac{B-b''}{b'-b''}\right)\,. \tag{1.7.13}$$

もし B が値 b' をとれば，この関数は 1 である．また B が b' とは異なる値をとれば 0

となる．そのためにデルタ記号で表した．これは観測記号を使うとどのように書けるだろうか？ 以下の式より

$$\delta(B,b') = \sum_{b''} \big|b''\big\rangle \delta(b'',b') \big\langle b''\big| = \big|b'b'\big| \,, \tag{1.7.14}$$

b' を選択する観測記号となる．これをはっきり示すには，次のように $\delta(B,b')$ に $B-b'$ を掛けると 0 となる n 次式になることに注目すればよい．

$$0 = (B-b')\delta(B,b') = (B-b')\big|b'\big\rangle\big\langle b'\big| = 0 \,. \tag{1.7.15}$$

ところで，単位記号 1 もやはり B の関数であり，それは B のどの値に対しても 1 となる．

$$\big\langle b'\big|1 = \big\langle b'\big| = 1\big\langle b'\big| \,. \tag{1.7.16}$$

単位記号は，$\big|b'b'\big|$ を B で表した多項式，および完全性を用いて B の関数として以下のように書くことができる．

$$1 = \sum_{b'} \prod_{b''(\neq b')} \left(\frac{B-b''}{b'-b''}\right) \,. \tag{1.7.17}$$

実際，右辺は B のいかなる値に対しても $1+0+\cdots+0=1$ より 1 となる．

1.8　パウリ演算子の代数

この物理量の記号的表現を例で説明するために，シュテルン・ゲルラッハの実験に返り，可能な値として $+1,-1$ の 2 通りがある磁気モーメント μ_z/μ について考えてみよう．パウリ* (1927) にしたがい，この物理量を σ_z と書く．可能な値は $\sigma_z' = +1,-1$ である．すると

$$(\sigma_z - 1)(\sigma_z + 1) = \sigma_z^2 - 1 = 0 \tag{1.8.1}$$

であり，また以下の式が成り立つ(符号のみで十分なので σ_z' および 1 は略した)．

$$\begin{aligned} \big|{+}{+}\big| &= \frac{\sigma_z - (-1)}{1-(-1)} = \frac{1+\sigma_z}{2} \,, \\ \big|{-}{-}\big| &= \frac{\sigma_z - 1}{-1-1} \quad = \frac{1-\sigma_z}{2} \,. \end{aligned} \tag{1.8.2}$$

これより次のようになる．

$$\big|{+}{+}\big| + \big|{-}{-}\big| = 1, \qquad \big|{+}{+}\big| - \big|{-}{-}\big| = \sigma_z \,. \tag{1.8.3}$$

また $\sigma_z^2 = 1$ より

*Wolfgang PAULI (1900–1958)

$$|{+}{+}||{+}{+}| = \left(\frac{1+\sigma_z}{2}\right)^2 = \frac{1}{4}(1+1+2\sigma_z) = \frac{1+\sigma_z}{2} = |{+}{+}|\,,$$
$$|{-}{-}||{-}{-}| = \left(\frac{1-\sigma_z}{2}\right)^2 = \frac{1}{4}(1+1-2\sigma_z) = \frac{1-\sigma_z}{2} = |{-}{-}| \tag{1.8.4}$$

および

$$|{+}{+}||{-}{-}| = \frac{1+\sigma_z}{2}\frac{1-\sigma_z}{2} = \frac{1-\sigma_z^2}{4} = 0 \tag{1.8.5}$$

を得ることも注意しよう．

観測記号 $|\sigma'_z\sigma''_z|$ は $\sigma'_z = \pm 1$ および $\sigma''_z = \pm 1$ より全体で $4 = 2^2$ 個存在する．すでに $|{+}{+}|$ および $|{-}{-}|$，または別表現として 1 と σ_z を示した．さて 3 次元空間においては σ_x および σ_y も存在しなければならない．そして空間のすべての方向は等価なので σ_x および σ_y の観測結果も ± 1 であり，以下の関係式が成立しなければならない．

$$\sigma_x^2 = 1, \qquad \sigma_y^2 = 1\,. \tag{1.8.6}$$

このような物理量を $|{+}{-}|$ と $|{-}{+}|$ で表すことができるのだろうか？

まずこれらの積の性質を書き下してみよう．

$$|{+}{-}||{+}{-}| = 0\,, \qquad |{-}{+}||{-}{+}| = 0\,,$$
$$|{+}{-}||{-}{+}| = |{+}{+}|\,, \qquad |{-}{+}||{+}{-}| = |{-}{-}|\,. \tag{1.8.7}$$

ここで $|{+}{-}|$ および $|{-}{+}|$ の 2 乗は 0 なので，2 乗して 1 となるものを作るには両方がなければならない．そこで

$$\Big[|{-}{+}| + |{+}{-}|\Big]^2 = \underbrace{|{-}{+}||{-}{+}|}_{=0} + \underbrace{|{+}{-}||{-}{+}|}_{=|{+}{+}|} + \underbrace{|{-}{+}||{+}{-}|}_{=|{-}{-}|} + \underbrace{|{+}{-}||{+}{-}|}_{=0} = 1 \tag{1.8.8}$$

だから，σ_x を以下のように定義する．

$$\sigma_x = |{-}{+}| + |{+}{-}|\,. \tag{1.8.9}$$

残された唯一の形は差であり，以下のようになる．

$$\Big[|{-}{+}| - |{+}{-}|\Big]^2 = 0 - |{+}{+}| - |{-}{-}| + 0 = -1. \tag{1.8.10}$$

もし空間が 2 次元なら，σ_x と σ_z でいいだろう．しかし 3 次元空間では最後の項の 2 乗を $+1$ にすることは $\mathrm{i}^2 = -1$ を導入しない限りできない．実数だけでは機能しないのである．したがって σ_z と σ_x のほかに以下の量を導入しよう．

$$\sigma_y = \mathrm{i}|{-}{+}| - \mathrm{i}|{+}{-}|\,. \tag{1.8.11}$$

以上の結果は逆に書き直すと次のようになる．

$$\left|+-\right| = \tfrac{1}{2}\left(\sigma_x + i\sigma_y\right), \quad \left|-+\right| = \tfrac{1}{2}\left(\sigma_x - i\sigma_y\right) \ . \tag{1.8.12}$$

これより

$$0 = \left[\left|+-\right|\right]^2 = \tfrac{1}{4}\left(\sigma_x + i\sigma_y\right)^2 = \tfrac{1}{4}\left[1 - 1 + \mathrm{i}(\sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x)\right] \tag{1.8.13}$$

つまり

$$\sigma_x\sigma_y + \sigma_y\sigma_x = 0 \ , \quad \sigma_y\sigma_x = -\sigma_x\sigma_y \tag{1.8.14}$$

を得る．ここで $\left|+-\right|\left|-+\right| = \left|++\right|$ を使うと

$$\tfrac{1}{4}\underbrace{(\sigma_x + \mathrm{i}\sigma_y)(\sigma_x - \mathrm{i}\sigma_y)}_{=1+1-2\mathrm{i}\sigma_x\sigma_y} = \tfrac{1}{2}(1 + \sigma_z) \tag{1.8.15}$$

となり，これより次の関係式を得る．

$$\sigma_x\sigma_y = \mathrm{i}\sigma_z \ . \tag{1.8.16}$$

そして式(1.8.14)と組み合わせると以下の関係式を得る．

$$\sigma_x\sigma_z + \sigma_z\sigma_x = 0, \quad \sigma_y\sigma_z + \sigma_z\sigma_y = 0 \ . \tag{1.8.17}$$

また式(1.8.16)に σ_z を掛けると次式の最初の部分が得られ，左辺の積の順序を 2 回変えることで後半が得られる．

$$\sigma_x\sigma_y\sigma_z = \mathrm{i} = \sigma_y\sigma_z\sigma_x = \sigma_z\sigma_x\sigma_y \ . \tag{1.8.18}$$

つまり添え字は巡回置換可能である．したがって $\sigma_x\sigma_y = \mathrm{i}\sigma_z$ に対応して以下の関係式が得られる．

$$\sigma_y\sigma_z = \mathrm{i}\sigma_x, \quad \sigma_z\sigma_x = \mathrm{i}\sigma_y \ . \tag{1.8.19}$$

この 4 個の $\left|\pm\pm\right|$ 演算子の代数を $1, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ の 4 個の代数に直接転換するのは少々ぎこちないが，パウリのベクトル演算子 $\boldsymbol{\sigma}$ の代数的な性質はすっきりしている．これらをまとまった形で表す 1 つの方法は，ある 2 個の数値ベクトル $\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{b}$ を考えることである．すると

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{b} &= (\sigma_x a_x + \sigma_y a_y + \sigma_z a_z)(\sigma_x b_x + \sigma_y b_y + \sigma_z b_z) \\ &= a_x b_x + a_y b_y + a_z b_z + \mathrm{i}\sigma_x(a_y b_z - a_z b_y) + \cdots\end{aligned} \tag{1.8.20}$$

となり，以下のようになる．

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}\ \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{b} = \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b} + \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b} \ . \tag{1.8.21}$$

これが積の性質をすべて統合している．特にベクトルがある方向の単位ベクトル，つまり $\boldsymbol{a} = \boldsymbol{b} = \boldsymbol{n}$ であるとすると，

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})^2 = 1 \tag{1.8.22}$$

となり，$\boldsymbol{\sigma}$ のどの方向の成分を測定しても結果は $+1$ と -1 であることを示している．観測の結果が**離散的**であることと，測定の方向を**連続的**に変化させることができるという一見矛盾することは，観測記号の異なる成分が非可換であることで解決できるのである．

1.9 随伴記号とエルミート記号

さて，まだいくつかの事柄を調べなければならないので，そのための手法を展開しよう．まず逐次行う観測行為はそれに対応する記号の積で表したが，これには任意性があることに注意しよう．これまでは積は左から右(L → R)への順に並べた．しかしこれは文化的な偏見である．対等に右から左へと順序付けることも可能である．座標系の選択の自由度の場合と同様に，物理的な記述の妥当性は採用している記述法に依存してはならない．したがってある記述法で書かれた正しい関係式は，別の記述法に変えたとしても正しい関係式でなければならない．このことを数学的な演算として扱い，エルミート*共役(随伴)と呼び，† という記号で表す．

ついでながら，$\langle a'|b'\rangle$ をそれ自体では確率と見なすことができないもう 1 つの理由がある．記述法を逆転させると $\langle a'|b'\rangle$ の意味は $\langle b'|a'\rangle$ となる．物理的な確率は変化してはならないので，$\langle a'|b'\rangle$ ではなく $\langle a'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle$ なのである．

観測記号 $|a'a''|$ は，左から右(右利き)に読むと a' 原子を選び(消滅させ)，a'' 原子を生成すると解釈される．もし右から左(左利き)に読むとそれは a'' 原子を選び，a' 原子を生成するという意味になる．これを以下のように表す．

$$|a'a''|^\dagger = |a''a'| \,. \tag{1.9.1}$$

これはもとの記述法の新しい解釈である．これを $|a'a''|$ のエルミート共役(随伴)は $|a''a'|$ であるという．(たとえば $(\mathrm{PAN})^\dagger = \mathrm{NAP}$ と比べてみよ)．特別な例として以下に注目しよう．

$$|a'a'|^\dagger = |a'a'| \,. \tag{1.9.2}$$

このようなもとと同じになる演算子は自己随伴またはエルミートであると呼ばれる．(どちらから読んでも同じになる言葉，たとえば $(\mathrm{MOM})^\dagger = \mathrm{MOM}$ と比べてみよ)．

左および右ベクトル $\langle a'|$ と $|a'\rangle$ は，右利きではそれぞれ a' 原子の生成および a' 原子の消滅と理解される．左利きの記述法では $\langle a'|$ は a' 原子の消滅を表し，$|a'\rangle$ は a' 原子の生成を表す．したがって

$$\langle a'|^\dagger = |a'\rangle \,, \quad |a'\rangle^\dagger = \langle a'| \,. \tag{1.9.3}$$

---

*Charles HERMITE (1822–1901)

ここでわかるように，一般的にエルミート共役†の繰り返しは以下のようにもとに戻す．

$$(X^{\dagger})^{\dagger} = X\ . \tag{1.9.4}$$

学んだことをまとめて別の一般的な規則を示そう．

$$\Big(|a'\rangle\langle a''|\Big)^{\dagger} = |a''\rangle\langle a'| = \Big(\langle a''|\Big)^{\dagger}\Big(|a'\rangle\Big)^{\dagger}\ . \tag{1.9.5}$$

つまり積のエルミート共役は，順序を逆にしたエルミート共役の積である．

$$(XY)^{\dagger} = Y^{\dagger}X^{\dagger}\ . \tag{1.9.6}$$

より複雑な例をあげる．

$$\Big(|a'b'||c'd'|\Big)^{\dagger} = |d'c'||b'a'| = |c'd'|^{\dagger}|a'b'|^{\dagger}\ . \tag{1.9.7}$$

ここで最初の等号の両辺を書き変えて

$$\begin{aligned} |a'b'||c'd'| &= |a'\rangle\langle b'|c'\rangle\langle d'| = \langle b'|c'\rangle|a'd'|\ , \\ |d'c'||b'a'| &= |d'\rangle\langle c'|b'\rangle\langle a'| = \langle b'|c'\rangle^{*}|d'a'| \end{aligned} \tag{1.9.8}$$

とすると，新しい結果

$$\Big(\langle b'|c'\rangle|a'd'|\Big)^{\dagger} = \langle b'|c'\rangle^{*}|a'd'|^{\dagger} \tag{1.9.9}$$

を得る．つまり数値のエルミート共役は複素共役となる．

$$(\lambda X)^{\dagger} = \lambda^{*}X^{\dagger}\ . \tag{1.9.10}$$

ここで λ は任意の複素数である．

エルミート共役†は積に対しては，順序を逆にしたが，和に対してそのままであることも注意しよう．

$$(X+Y)^{\dagger} = X^{\dagger} + Y^{\dagger}\ . \tag{1.9.11}$$

これより単位記号はエルミートとなる．

$$1^{\dagger} = \left(\sum_{a'}|a'a'|\right)^{\dagger} = \sum_{a'}|a'a'|^{\dagger} = \sum_{a'}|a'a'| = 1\ . \tag{1.9.12}$$

また，すべての物理量の記号

$$B = \sum_{b'}|b'\rangle b'\langle b'| \qquad \text{ただし} \quad b'^{*} = b' \tag{1.9.13}$$

はエルミートである．

$$B^{\dagger} = \sum_{b'}\langle b'|^{\dagger}b'^{*}|b'\rangle^{\dagger} = \sum_{b'}|b'\rangle b'\langle b'| = B\ . \tag{1.9.14}$$

これを以下の演算子で確かめてみよう.

$$\begin{aligned} 1 &= \big|{+}{+}\big| + \big|{-}{-}\big| \,, \\ \sigma_z &= \big|{+}{+}\big| - \big|{-}{-}\big| \,, \\ \sigma_x &= \big|{-}{+}\big| + \big|{+}{-}\big| \,, \\ \sigma_y &= \mathrm{i}\big|{-}{+}\big| - \mathrm{i}\big|{+}{-}\big| \,. \end{aligned} \tag{1.9.15}$$

ここで, 1 と σ_z はすでに示した例と同じでエルミートである. しかし σ_x と σ_y は示した例と同じ形ではない. しかしエルミート共役の演算は空間の方向を区別するはずがないではないか? 心配無用, 以下のようにともにエルミートであることを示すことができる.

$$\begin{aligned} \sigma_x^\dagger &= \big|{-}{+}\big|^\dagger + \big|{+}{-}\big|^\dagger = \big|{+}{-}\big| + \big|{-}{+}\big| = \sigma_x \,, \\ \sigma_y^\dagger &= -\mathrm{i}\big|{-}{+}\big|^\dagger + \mathrm{i}\big|{+}{-}\big|^\dagger = -\mathrm{i}\big|{+}{-}\big| + \mathrm{i}\big|{-}{+}\big| = \sigma_y \,. \end{aligned} \tag{1.9.16}$$

σ の代数はエルミート共役に対してどのような振舞いをするだろうか. 以下の関係式

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{b} = \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b} + \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b} \tag{1.9.17}$$

のエルミート共役は($\boldsymbol{a}$, $\boldsymbol{b}$ は実ベクトルとする)次のようになる.

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{b}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a} &= \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b} - \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b} \\ &= \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{a} + \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{b}\times\boldsymbol{a} \,. \end{aligned} \tag{1.9.18}$$

つまりもととまったく同じ関係式を与える.

1.10 行列表現

パウリ演算子 σ_x と σ_y は, ある物理量 B を別の物理量 A の観測記号で表す例である. このことを一般的に単位記号 1 の構造を利用して行おう.

$$\begin{aligned} B = 1B1 &= \sum_{a'} \big|a'\big\rangle\big\langle a'\big| B \sum_{a''} \big|a''\big\rangle\big\langle a''\big| \\ &= \sum_{a',a''} \big\langle a'\big|B\big|a''\big\rangle \big|a'a''\big| \,. \end{aligned} \tag{1.10.1}$$

これは B が n^2 個の観測記号 $\big|a'a''\big|$ の, $n\times n = n^2$ 個の値 $\big\langle a'\big|B\big|a''\big\rangle$ を係数とする線形結合であることを示している. これらの係数は $n\times n$ の正方行列で表すことができる.

$$\begin{array}{cc} & a'' \rightarrow \text{列} \\ \begin{array}{c} a' \\ \downarrow \\ \text{行} \end{array} & \begin{pmatrix} \langle a_1|B|a_1\rangle & \cdots & \langle a_1|B|a_n\rangle \\ \vdots & & \vdots \\ \langle a_n|B|a_1\rangle & \cdots & \langle a_n|B|a_n\rangle \end{pmatrix} . \end{array} \tag{1.10.2}$$

たとえばパウリの演算子は行列として以下のように書ける.

$$\sigma_x : \begin{array}{c} \\ + \\ - \end{array} \begin{array}{c} \begin{array}{cc} + & - \end{array} \\ \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \end{array} , \ \sigma_y : \begin{pmatrix} 0 & -\mathrm{i} \\ \mathrm{i} & 0 \end{pmatrix} , \ \sigma_z : \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} , \ 1 : \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} . \tag{1.10.3}$$

これらはパウリ行列として知られている.

物理量 B は a 表示による行列表現 B で決定される．したがって B を含むすべての代数的な演算や他の物理的な性質はそれらの行列で表される．以下が基本的な代数演算の性質である.

B と C の和:

$$\langle a'|(B+C)|a''\rangle = \langle a'|B|a''\rangle + \langle a'|C|a''\rangle . \tag{1.10.4}$$

B と C の積:

$$\begin{aligned} \langle a'|BC|a'''\rangle &= \langle a'|B\,1\,C|a'''\rangle \\ &= \sum_{a''} \langle a'|B|a''\rangle\langle a''|C|a'''\rangle . \end{aligned} \tag{1.10.5}$$

B の定数倍:

$$\langle a'|\lambda B|a''\rangle = \lambda\langle a'|B|a''\rangle . \tag{1.10.6}$$

エルミート共役という概念はここには出てこないことに注意しよう．そこで B, C の代わりに必ずしもエルミートではない演算子 X, Y で置き換えて考えてみよう(文字を変えたのは単に便宜上のため).

$$X = \sum_{a',a''} \langle a''|X|a'\rangle |a''a'| . \tag{1.10.7}$$

するとエルミート共役は以下のようになる.

$$X^\dagger = \sum_{a',a''} \langle a''|X|a'\rangle^* |a'a''| . \tag{1.10.8}$$

これより以下のように，行列のエルミート共役は元の行列の複素共役を転置(行 $\leftrightarrow$ 列)

したものとなる.

$$\langle a'|X^\dagger|a''\rangle = \langle a''|X|a'\rangle^* \ . \tag{1.10.9}$$

もし X がエルミートである B ならば，その行列は以下の条件を満たす.

$$\langle a'|B|a''\rangle = \langle a''|B|a'\rangle^* \ . \tag{1.10.10}$$

このことはパウリ行列に対しては簡単に確かめることができる.

複素共役は数に対するエルミート共役であることに注意しよう．つまり以下のように，積演算子のエルミート共役

$$\langle a'|b'\rangle^* = |b'\rangle^\dagger \langle a|^\dagger = \langle b'|a'\rangle \tag{1.10.11}$$

および

$$\langle a''|X|a'\rangle^* = |a'\rangle^\dagger X^\dagger \langle a''|^\dagger = \langle a'|X^\dagger|a''\rangle \tag{1.10.12}$$

を求めればよい.

1.11 トレース

物事の順序を反対にするもう1つの有用な概念が存在する．観測記号 $|a'a''|$ はベクトルの積 $|a'\rangle\langle a''|$ である．ここでベクトルの積の順序を逆にすると数値 $\langle a''|a'\rangle = \delta(a', a'')$ を得る．この演算はトレース(trace; ドイツ語で Spur)と呼ばれる．したがって

$$\mathrm{tr}\left\{|a'a''|\right\} = \delta(a', a'') \tag{1.11.1}$$

である．同じように次の式も成立する.

$$\mathrm{tr}\left\{|b'b''|\right\} = \delta(b', b'') \ . \tag{1.11.2}$$

このことは異なる2つの観測記号の間の次の線形関係と両立するだろうか？

$$\begin{aligned} |b'b''| &= \sum_{a',a''} |a'\rangle\langle a'|b'\rangle\langle b''|a''\rangle\langle a''| \\ &= \sum_{a',a''} \langle a'|b'\rangle\langle b''|a''\rangle |a'a''| \ ? \end{aligned} \tag{1.11.3}$$

トレースが和とか定数を掛けることには影響しないことに注意すれば，上記の式の1行目を並べ直すことで，以下のようになるのを示すことができる.

$$\begin{aligned} \mathrm{tr}\left\{|b'b''|\right\} &= \sum_{a',a''} \langle b''|a''\rangle\langle a''|a'\rangle\langle a'|b'\rangle \\ &= \langle b''|b'\rangle = \delta(b', b'') \ . \end{aligned} \tag{1.11.4}$$

トレースは行列で書いてある場合は簡単な意味を持っている．

$$X = \sum_{a',a''} \langle a'|X|a''\rangle |a'a''| \,. \tag{1.11.5}$$

この形の演算子のトレースをとると次のようになる．

$$\operatorname{tr}\{X\} = \sum_{a',a''} \langle a'|X|a''\rangle \delta(a',a'') = \sum_{a'} \langle a'|X|a'\rangle \,. \tag{1.11.6}$$

これはいわゆる行列の対角成分の和である．式(1.10.3)のパウリ行列を一見すればわかるようにすべての成分のトレースは0となる．

$$\operatorname{tr}\{\boldsymbol{\sigma}\} = 0 \,. \tag{1.11.7}$$

単位記号に関するパウリ行列の例でわかるように，単位記号は一般的に

$$\langle a'|1|a''\rangle = \delta(a',a'') \tag{1.11.8}$$

となるから，トレースは物理量 A，B などがとり得る値の数となる．

$$\operatorname{tr}\{1\} = n \,. \tag{1.11.9}$$

トレースをとる操作を逆にすることで，ベクトルを含むどんな数値も以下のようにトレースとして書くことができる．

$$\langle a'|X|a''\rangle = \operatorname{tr}\{X|a''a'|\} = \operatorname{tr}\{|a''a'|X\} \,. \tag{1.11.10}$$

上の式に $\langle a''|Y|a'\rangle$ を掛けて，a', a'' で和をとると以下のようになる．

$$\operatorname{tr}\{XY\} = \operatorname{tr}\{YX\} \,. \tag{1.11.11}$$

つまりこのような記号の積のトレースは積の順序に無関係である．この対称性の例として $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{b} = \boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b} + \mathrm{i}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}$ のトレースをとってみよう．

$$\operatorname{tr}\{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{b}\} = 2\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b} \,. \tag{1.11.12}$$

これは確かに $\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{b}$ について対称となっている．

行列要素をトレースで書いた関係式

$$\langle B\rangle_{a'} = \langle a'|B|a'\rangle = \operatorname{tr}\{|a'a'|B\} \tag{1.11.13}$$

は B の代わりに任意の関数 $f(B)$ に対しても適用できる．特に関数 $\delta(B,b') = |b'b'|$ について考えてみよう．これは数値として B が b' のとき1で，それ以外は0である．

$$\langle \delta(B,b')\rangle_{a'} = p(a',b') = \operatorname{tr}\{|a'a'||b'b'|\} \,. \tag{1.11.14}$$

もちろん上記の式が $\langle a'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle$ であることは直接確めることができる．

トレースの公式が便利であることを見るために，以下の結果

$$\sigma'_z = +1 : \left|++\right| = \frac{1+\sigma_z}{2} \; ; \quad \sigma'_z = -1 : \left|--\right| = \frac{1-\sigma_z}{2} \tag{1.11.15}$$

つまり

$$\left|\sigma'_z \sigma'_z\right| = \tfrac{1}{2}(1 + \sigma'_z \sigma_z) \tag{1.11.16}$$

を思い出してみよう．これは z 方向についてだけの特別なことではない．ここで同じ関係式を物理量 A と B，つまり $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}_1$ と $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}_2$ に適用してみよう．ここで $\boldsymbol{n}_{1,2}$ は2つの異なる方向の単位ベクトルである．すると次のようになる．

$$\begin{aligned} p(\sigma'_1, \sigma'_2) &= \mathrm{tr}\left\{ \frac{1+\sigma'_1 \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}_1}{2} \frac{1+\sigma'_2 \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}_2}{2} \right\} \\ &= \tfrac{1}{4}\mathrm{tr}\left\{1 + \sigma'_1 \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}_1 + \sigma'_2 \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}_2 + \sigma'_1\sigma'_2 \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}_1 \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}_2\right\} \\ &= \tfrac{1}{2}\left(1 + \sigma'_1\sigma'_2 \boldsymbol{n}_1\cdot\boldsymbol{n}_2\right) = \tfrac{1}{2}\left(1 + \sigma'_1\sigma'_2 \cos\theta\right) \, . \end{aligned} \tag{1.11.17}$$

ここで θ は2つの異なる方向の間の角度である．これよりすでに推論したように以下の結果を得る．

$$\begin{aligned} p(+,+) = p(-,-) &= \frac{1+\cos\theta}{2} = \cos^2(\tfrac{1}{2}\theta) \, , \\ p(+,-) = p(-,+) &= \frac{1-\cos\theta}{2} = \sin^2(\tfrac{1}{2}\theta) \, . \end{aligned} \tag{1.11.18}$$

1.12 ユニタリー幾何学

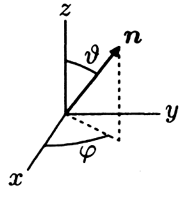
1.12.1 列と行ベクトルおよび波動関数

以下の式の σ_z 表示による行列表現を調べるのは教育的である．

$$\left|\sigma'_n \sigma'_n\right| = \frac{1+\sigma'_n \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}}{2} \, . \tag{1.12.1}$$

ここで単位ベクトル $\boldsymbol{n}$ をパラメータ化するのに以下の極座標を使うことにする．

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n} = \; & \sigma_x \sin\vartheta\cos\varphi \\ & +\sigma_y \sin\vartheta\sin\varphi \\ & +\sigma_z \cos\vartheta \, . \end{aligned} \tag{1.12.2}$$



すると $\left|\sigma'_n \sigma'_n\right|$ は次のような行列で書ける．

$$\langle\sigma_z'|\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}|\sigma_z''\rangle = \begin{array}{c}\sigma_z'\backslash\sigma_z''\\ \begin{pmatrix}\cos\vartheta & \sin\vartheta\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\\ \sin\vartheta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} & -\cos\vartheta\end{pmatrix}\end{array}. \tag{1.12.3}$$

したがって以下の式を得る．

$$\begin{aligned}\langle\sigma_z'|\sigma_n'=+1\rangle\langle\sigma_n'=+1|\sigma_z''\rangle &= \langle\sigma_z'|\frac{1+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}}{2}|\sigma_z''\rangle\\ &= \begin{pmatrix}\cos^2(\frac{1}{2}\vartheta) & \cos(\frac{1}{2}\vartheta)\sin(\frac{1}{2}\vartheta)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\\ \cos(\frac{1}{2}\vartheta)\sin(\frac{1}{2}\vartheta)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} & \sin^2(\frac{1}{2}\vartheta)\end{pmatrix}.\end{aligned} \tag{1.12.4}$$

これは $\langle\sigma_z'|\sigma_n'=+1\rangle\langle\sigma_n'=+1|\sigma_z''\rangle$ と書かれているように，積で書けるはずである．実際この行列は列と行の積で以下のように書ける．

$$\begin{pmatrix}\cos(\frac{1}{2}\vartheta)\\ \sin(\frac{1}{2}\vartheta)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos(\frac{1}{2}\vartheta)\ , \sin(\frac{1}{2}\vartheta)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\end{pmatrix}. \tag{1.12.5}$$

または列に $\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi}$ を掛け，行に $\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi}$ を掛けて，以下の形に書いてもよい．

$$\begin{aligned}\langle\sigma_z'|\sigma_n'=+1\rangle &= \begin{pmatrix}\cos(\frac{1}{2}\vartheta)\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi}\\ \sin(\frac{1}{2}\vartheta)\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi}\end{pmatrix};\\ \langle\sigma_n'=+1|\sigma_z''\rangle &= \begin{pmatrix}\cos(\frac{1}{2}\vartheta)\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi}\ , \sin(\frac{1}{2}\vartheta)\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi}\end{pmatrix}.\end{aligned} \tag{1.12.6}$$

$\langle\sigma_z'|\sigma_n'=+1\rangle^* = \langle\sigma_n'=+1|\sigma_z'\rangle$ の関係より，行の要素は列の要素の複素共役となっている．

同様にして $\sigma_n'=-1$ に対しても以下の結果が得られる．

$$\begin{aligned}\langle\sigma_z'|\sigma_n'=-1\rangle\langle\sigma_n'=-1|\sigma_z''\rangle &= \langle\sigma_z'|\frac{1-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}}{2}|\sigma_z''\rangle\\ &= \begin{pmatrix}\sin^2(\frac{1}{2}\vartheta) & -\sin(\frac{1}{2}\vartheta)\cos(\frac{1}{2}\vartheta)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi}\\ -\sin(\frac{1}{2}\vartheta)\cos(\frac{1}{2}\vartheta)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} & \cos^2(\frac{1}{2}\vartheta)\end{pmatrix}\\ &= \begin{pmatrix}-\sin(\frac{1}{2}\vartheta)\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi}\\ \cos(\frac{1}{2}\vartheta)\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-\sin(\frac{1}{2}\vartheta)\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi}\ , \cos(\frac{1}{2}\vartheta)\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi}\end{pmatrix}.\end{aligned} \tag{1.12.7}$$

ここで得られたことの意味は，一般的には以下のように，あるベクトル $|b'\rangle$ は a ベクトルの線形結合で書けるということである．

$$|b'\rangle = 1|b'\rangle = \sum_{a'}|a'\rangle\langle a'|b'\rangle. \tag{1.12.8}$$

このことは，ベクトル $|b'\rangle$ は a ベクトルの成す正規直交系，つまり a 座標系に対する成分が $\langle a'|b'\rangle$ であることを表している．「波動関数」という概念を伴う別の記法で書

くと次のようになる.

$$\langle a' | b' \rangle = \psi_{b'}(a') \ . \tag{1.12.9}$$

したがって次のように書ける.

$$| b' \rangle = \sum_{a'} | a' \rangle \psi_{b'}(a') \ . \tag{1.12.10}$$

これのエルミート共役は以下のようになる.

$$\langle b' | = \sum_{a'} \psi_{b'}(a')^* \langle a' | \ . \tag{1.12.11}$$

2個のベクトルの積をその成分で書き表すためには，直接掛け算をして以下のように求めるか

$$\begin{aligned} \langle b' | b'' \rangle &= \sum_{a'a''} \psi_{b'}(a')^* \underbrace{\langle a' | a'' \rangle}_{=\delta(a',a'')} \psi_{b''}(a'') \\ &= \sum_{a'} \psi_{b'}(a')^* \psi_{b''}(a') \end{aligned} \tag{1.12.12}$$

または $1 = \sum_{a'} | a' \rangle \langle a' |$ を使って

$$\langle b' | b'' \rangle = \sum_{a'} \langle b' | a' \rangle \langle a' | b'' \rangle = \sum_{a'} \psi_{b'}(a')^* \psi_{b''}(a') \ . \tag{1.12.13}$$

として求めることもできる.

ベクトル b' の長さの2乗は以下のようになることに注意しよう.

$$\langle b' | b' \rangle = \sum_{a'} | \psi_{b'}(a') |^2 > 0 \ . \tag{1.12.14}$$

ここで，複素数であるベクトルの成分の絶対値の2乗の和が，ユークリッド幾何の2乗の和に対応している．この種の幾何学は**ユニタリー**と呼ばれる．ベクトル b' の正規直交性は以下のように表現される.

$$\begin{aligned} &\sum_{a'} | \psi_{b'}(a') |^2 = 1 \ , \\ b' \neq b'' : \quad &\sum_{a'} \psi_{b'}(a')^* \psi_{b''}(a') = 0 \ . \end{aligned} \tag{1.12.15}$$

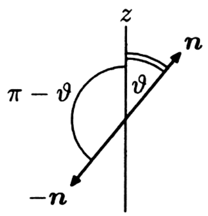
ここで，次の2個の波動関数について考えてみよう.

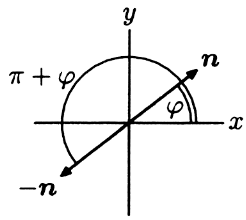
$$\begin{aligned} \psi_{\sigma'_n=+1}(\sigma'_z) &= \begin{pmatrix} \cos(\frac{1}{2}\vartheta)\ \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi} \\ \sin(\frac{1}{2}\vartheta)\ \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi} \end{pmatrix} \ , \\ \psi_{\sigma'_n=-1}(\sigma'_z) &= \begin{pmatrix} -\sin(\frac{1}{2}\vartheta)\ \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi} \\ \cos(\frac{1}{2}\vartheta)\ \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi} \end{pmatrix} \ . \end{aligned} \tag{1.12.16}$$

$\cos^2(\frac{1}{2}\vartheta) + \sin^2(\frac{1}{2}\vartheta) = 1$ だから，これらはともにユニタリー幾何学における単位ベクトルとなることは明らかである．そしてこれら 2 個のベクトルは以下のように直交している．

$$\langle \sigma_n' = +1 | \sigma_n' = -1 \rangle = \left(\cos(\tfrac{1}{2}\vartheta)\ \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi}\right)\left(-\sin(\tfrac{1}{2}\vartheta)\ \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi}\right) + \left(\sin(\tfrac{1}{2}\vartheta)\ \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi}\right)\left(\cos(\tfrac{1}{2}\vartheta)\ \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi}\right) = 0\,. \tag{1.12.17}$$

前述の $\sigma_n' = -1$ は $-\boldsymbol{n}$ 方向に対しては $\sigma_n' = +1$ であることを使うと，これら 2 個の波動関数は本質的には同じ形をしていることがわかる．以下の図のように，z 軸を横と上から眺めることにより，$-\boldsymbol{n}$ にするには，$\vartheta \to \pi - \vartheta$ および $\varphi \to \pi + \varphi$ とすればよい．





したがって次のようになる．

$$\psi_{\sigma_n'=+1} \to \begin{pmatrix} \cos\left(\frac{1}{2}(\pi - \vartheta)\right)\ \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}(\pi + \varphi)} \\ \sin\left(\frac{1}{2}(\pi - \vartheta)\right)\ \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}(\pi + \varphi)} \end{pmatrix} = \mathrm{i} \begin{pmatrix} -\sin(\frac{1}{2}\vartheta)\ \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi} \\ \cos(\frac{1}{2}\vartheta)\ \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi} \end{pmatrix} = \mathrm{i}\psi_{\sigma_n'=-1}\,. \tag{1.12.18}$$

因子 i が付いているが，これは意味があるのだろうか？ 答えは否である．もともと，積 $\psi_{-1}(\sigma_z')\psi_{-1}(\sigma_z'')^*$ より，ψ_{-1} を導いたのだが，このとき位相 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}$ については任意性がある．どんな α でも問題は生じない．これは正規直交性，完全性そして確率による物理的な解釈に対して，何の影響も与えない（問題 1-8 を参照）．波動関数の確率振幅という解釈は次のように表される．

$$p(\sigma_n', \sigma_z') = \left|\psi_{\sigma_n'}(\sigma_z')\right|^2\,. \tag{1.12.19}$$

そして結果はもちろん以下のようになる．ただし ϑ は z 方向と $\boldsymbol{n}$ との間の角度である．

$$p(+,+) = p(-,-) = \cos^2(\tfrac{1}{2}\vartheta)\,;$$
$$p(+,-) = p(-,+) = \sin^2(\tfrac{1}{2}\vartheta)\,. \tag{1.12.20}$$

1.12.2 パウリのベクトル演算子の任意の2成分の関係

任意の2つの方向 $\boldsymbol{n}_1$ と $\boldsymbol{n}_2$ (角度をそれぞれ ϑ_1, φ_1 および ϑ_2, φ_2 とする) に関する確率をこれらの波動関数を使って，以下のようにして求め直してみよう．

$$\langle \sigma_1' | \sigma_2' \rangle = \sum_{\sigma_z'} \langle \sigma_1' | \sigma_z' \rangle \langle \sigma_z' | \sigma_2' \rangle = \sum_{\sigma_z'} \psi_{\sigma_1'}(\sigma_z')^* \psi_{\sigma_2'}(\sigma_z') . \tag{1.12.21}$$

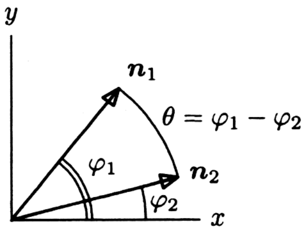
次の場合を考えれば十分であろう．

$$\begin{aligned} \langle +,1 | +,2 \rangle = &\cos\left(\tfrac{1}{2}\vartheta_1\right)\cos\left(\tfrac{1}{2}\vartheta_2\right) \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}(\varphi_1 - \varphi_2)} \\ &+ \sin\left(\tfrac{1}{2}\vartheta_1\right)\sin\left(\tfrac{1}{2}\vartheta_2\right) \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}(\varphi_1 - \varphi_2)} . \end{aligned} \tag{1.12.22}$$

まず，初めにベクトル $\boldsymbol{n}_1$ と $\boldsymbol{n}_2$ が次のような面内にある2つの特別な場合について見てみよう．

1. ともに x, y 面内にある場合は $\vartheta_1 = \vartheta_2 = \pi/2$ なので，次のようになる．

$$\begin{aligned} \langle +,1 | +,2 \rangle &= \tfrac{1}{2}\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\theta} + \tfrac{1}{2}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\theta} \\ &= \cos\left(\tfrac{1}{2}\theta\right) . \end{aligned}$$

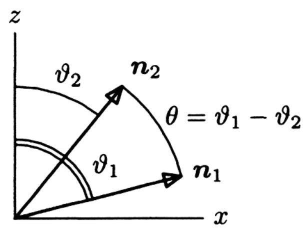


(1.12.23)

これは実数であり，正しい確率を与える．

2. ともに x, z 平面にあるとすると，$\varphi_1 = \varphi_2 = 0$ だから，次のようになる．

$$\begin{aligned} \langle +,1 | +,2 \rangle &= \cos\left(\tfrac{1}{2}\vartheta_1\right)\cos\left(\tfrac{1}{2}\vartheta_2\right) \\ &\quad + \sin\left(\tfrac{1}{2}\vartheta_1\right)\sin\left(\tfrac{1}{2}\vartheta_2\right) \\ &= \cos\left(\tfrac{1}{2}\theta\right) . \end{aligned}$$



(1.12.24)

このときも実数となり，正しい確率を与える．

これより2次元では何とか実数でうまくいくことが再びわかる．しかし一般的に正しい答えを得るためには複素数となることが本質的であることがわかる．一般的には以下のように，複素数の絶対値の2乗を計算する．

$$\left|\cos(\tfrac{1}{2}\vartheta_1)\cos(\tfrac{1}{2}\vartheta_2)\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}(\varphi_1-\varphi_2)}+\sin(\tfrac{1}{2}\vartheta_1)\sin(\tfrac{1}{2}\vartheta_2)\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}(\varphi_1-\varphi_2)}\right|^2$$

$$=\cos^2(\tfrac{1}{2}\vartheta_1)\cos^2(\tfrac{1}{2}\vartheta_2)+\sin^2(\tfrac{1}{2}\vartheta_1)\sin^2(\tfrac{1}{2}\vartheta_2)$$

$$+\sin(\tfrac{1}{2}\vartheta_1)\cos(\tfrac{1}{2}\vartheta_1)\sin(\tfrac{1}{2}\vartheta_2)\cos(\tfrac{1}{2}\vartheta_2)\underbrace{\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\varphi_1-\varphi_2)}+\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\varphi_1-\varphi_2)}\right)}_{=2\cos(\varphi_1-\varphi_2)}$$

$$=\tfrac{1}{2}(1+\cos\vartheta_1)\tfrac{1}{2}(1+\cos\vartheta_2)+\tfrac{1}{2}(1-\cos\vartheta_1)\tfrac{1}{2}(1-\cos\vartheta_2)$$

$$+\tfrac{1}{2}\sin\vartheta_1\sin\vartheta_2\cos(\varphi_1-\varphi_2)$$

$$=\tfrac{1}{2}\big[1+\underbrace{\cos\vartheta_1\cos\vartheta_2+\sin\vartheta_1\sin\vartheta_2\cos(\varphi_1-\varphi_2)}_{=\cos\theta}\big]=\cos^2(\tfrac{1}{2}\theta)\,. \tag{1.12.25}$$

これを次のように$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$を使って書くことで，別の見方をしてみよう．

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}=(\sigma_x\cos\varphi\ +\sigma_y\sin\varphi)\sin\vartheta+\sigma_z\cos\vartheta\,. \tag{1.12.26}$$

まず右辺の1項目の次の式から見てみよう．

$$\begin{aligned}\sigma_x\cos\varphi+\sigma_y\sin\varphi&=\sigma_x\,(\cos\varphi+\mathrm{i}\sigma_z\sin\varphi)\\&=(\cos\varphi-\mathrm{i}\sigma_z\sin\varphi)\,\sigma_x\,.\end{aligned} \tag{1.12.27}$$

これは，$\mathrm{i}^2=-1$に対応して$(\mathrm{i}\sigma_z)^2=-1$であることに注意して，オイラー*の公式を使うと以下のように書ける．

$$\cos\varphi\pm\mathrm{i}\sigma_z\sin\varphi=\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\sigma_z\varphi}\,. \tag{1.12.28}$$

この関係式はσ_zの指数関数が2通りの値をとり得ることから，以下のようにしても示すこともできる．

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\sigma_z\varphi}&=\underbrace{\frac{1+\sigma_z}{2}}_{=|{+}{+}|}\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\varphi}+\underbrace{\frac{1-\sigma_z}{2}}_{=|{-}{-}|}\mathrm{e}^{\mp\mathrm{i}\varphi}\\&=\cos\varphi\pm\mathrm{i}\sigma_z\sin\varphi\,.\end{aligned} \tag{1.12.29}$$

以上より次の関係式を得る．

$$\sigma_x\cos\varphi+\sigma_y\sin\varphi=\sigma_x\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi\,\sigma_z}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi\sigma_z}\sigma_x\,. \tag{1.12.30}$$

ここで右辺の2式はσ_xとσ_zが反交換することによる．ここでこの反交換の性質をもう一度使うことにより，次のようなより対称的な結果を得る．

$$\begin{aligned}\sigma_x\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi\,\sigma_z}=&\quad\sigma_x\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi\,\sigma_z}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi\,\sigma_z}&=\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi\,\sigma_z}\sigma_x\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi\,\sigma_z}\,,\\\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi\,\sigma_z}\sigma_x=&\quad\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi\,\sigma_z}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi\,\sigma_z}\sigma_x&=\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi\,\sigma_z}\sigma_x\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi\,\sigma_z}\,.\end{aligned} \tag{1.12.31}$$

*Leonhard EULER (1707–1783)

したがって以下のように書ける．

$$\sigma_x \cos\varphi + \sigma_y \sin\varphi = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi\sigma_z}\sigma_x\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi\sigma_z}\ . \tag{1.12.32}$$

以上より次の結果を得る．

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n} = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi\sigma_z}\left(\sigma_z\cos\vartheta + \sigma_x\sin\vartheta\right)\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi\sigma_z} \tag{1.12.33}$$

ここで式(1.12.26)の2項目については以下の式を使った．

$$\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi\sigma_z}\sigma_z\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi\sigma_z} = \sigma_z\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi\sigma_z}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi\sigma_z} = \sigma_z\ . \tag{1.12.34}$$

以上の導出で次の指数関数の性質を使ったことに注意しよう．

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda_1 A}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda_2 A} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\lambda_1+\lambda_2)A}\ . \tag{1.12.35}$$

この式は次のようにして示すことができる．

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda_1 A}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda_2 A} &= \sum_{a'}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda_1 a'}\big|a'a'\big|\sum_{a''}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda_2 a''}\big|a''a''\big| \\ &= \sum_{a'}\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\lambda_1+\lambda_2)a'}\big|a'a'\big| = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\lambda_1+\lambda_2)A}\ .\end{aligned} \tag{1.12.36}$$

同様にして $\varphi\to\vartheta$, $\sigma_x\to\sigma_z$, $\sigma_y\to\sigma_x$,$\sigma_z\to\sigma_y$ とすることで

$$\sigma_z\cos\vartheta + \sigma_x\sin\vartheta = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\vartheta\sigma_y}\sigma_z\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\vartheta\sigma_y} \tag{1.12.37}$$

となるので，次の結果を得る．

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n} = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi\sigma_z}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\vartheta\sigma_y}\sigma_z\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\vartheta\sigma_y}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi\sigma_z} = U^{-1}\sigma_z U\ . \tag{1.12.38}$$

ここで U は次式で与えられる．

$$U = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\vartheta\sigma_y}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi\sigma_z}\ ,\quad U^{-1} = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi\sigma_z}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\vartheta\sigma_y}\ . \tag{1.12.39}$$

2項目は確かに以下のように，逆の演算となっている．

$$\begin{aligned}UU^{-1} &= \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\vartheta\sigma_y}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi\sigma_z}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi\sigma_z}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\vartheta\sigma_y} = 1\ , \\ U^{-1}U &= \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi\sigma_z}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\vartheta\sigma_y}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\vartheta\sigma_y}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi\sigma_z} = 1\ .\end{aligned} \tag{1.12.40}$$

これは次の一般的な性質の例である．

$$(XY)^{-1} = Y^{-1}X^{-1}\ . \tag{1.12.41}$$

この異なる物理量の間の関係について解説する前に，ベクトルの間の関係について補足しておこう．以下の

$$\sigma_z = \sum_{\sigma'}\big|\sigma'_z=\sigma'\big\rangle\sigma'\big\langle\sigma'_z=\sigma'\big| \tag{1.12.42}$$

より，次の結果を得る．

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n} &= \sum_{\sigma'} U^{-1}\big|\sigma'_z=\sigma'\big\rangle\sigma'\big\langle\sigma'_z=\sigma'\big|U \\ &= \sum_{\sigma'}\big|\sigma'_n=\sigma'\big\rangle\sigma'\big\langle\sigma'_n=\sigma'\big| \,.\end{aligned} \tag{1.12.43}$$

したがって次のように書ける．

$$\begin{aligned}\big\langle\sigma'_n=\sigma'\big| &= \big\langle\sigma'_z=\sigma'\big|U \,, \\ \big|\sigma'_n=\sigma'\big\rangle &= U^{-1}\big|\sigma'_z=\sigma'\big\rangle \,.\end{aligned} \tag{1.12.44}$$

左と右ベクトルのエルミート共役関係より

$$\big(\big\langle\sigma'_z\big|U\big)^\dagger = U^{-1}\big|\sigma'_z\big\rangle \tag{1.12.45}$$

がわかり，また左辺は

$$U^\dagger\big\langle\sigma'_z\big|^\dagger = U^\dagger\big|\sigma'_z\big\rangle \tag{1.12.46}$$

と書けるので，次の結果を得る．

$$U^\dagger = U^{-1}\,,\quad U^\dagger U = UU^\dagger = 1\,. \tag{1.12.47}$$

この点は，直接確かめることもできる．まず以下の式に注意すると，

$$\begin{aligned}\Big(\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi\,\sigma_z}\Big)^\dagger &= \Big(\cos\frac{\varphi}{2}+\mathrm{i}\sigma_z\sin\frac{\varphi}{2}\Big)^\dagger \\ &= \cos\frac{\varphi}{2}-\mathrm{i}\sigma_z\sin\frac{\varphi}{2} \\ &= \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi\,\sigma_z}\end{aligned} \tag{1.12.48}$$

単に $\mathrm{i}\to-\mathrm{i}$ となっていることがわかる．したがって以下の結果を得る．

$$U^\dagger = \Big(\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\vartheta\,\sigma_y}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi\,\sigma_z}\Big)^\dagger = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi\,\sigma_z}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\vartheta\,\sigma_y} = U^{-1}\,. \tag{1.12.49}$$

U の性質を使うと σ_z と同様に，$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n}$ もエルミートであることを示すことができる（$U^{\dagger\dagger}=U$ に注意）．

$$\big(U^\dagger\sigma_z U\big)^\dagger = U^\dagger\sigma_z U\,. \tag{1.12.50}$$

また $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})^2=1$ という条件がどのようにして満足されているかについては，以下の計算に注目して欲しい．

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n})^2 = U^{-1}\sigma_z UU^{-1}\sigma_z U = U^{-1}1U = 1\,. \tag{1.12.51}$$

1.13 ユニタリー演算子

今までに学んだことをここではより一般的に記述してみよう．物理量 A は値 $a_1, a_2, \ldots,$ a_n をとり得る．そして物理量 B も同じく値 $b_1 = a_1, \ldots, b_n = a_n$ をとるとする．ここで以下の演算子を考えよう．

$$U_{ab} = \sum_{k=1}^{n} \big|a_k\big\rangle\big\langle b_k\big| \,, \qquad U_{ba} = \sum_{k} \big|b_k\big\rangle\big\langle a_k\big| \,,$$
$$U_{ab}^{\dagger} = U_{ba} \,, \qquad U_{ba}^{\dagger} = U_{ab} \,. \tag{1.13.1}$$

これに対して以下の関係が成り立つ．

$$U_{ab}U_{ba} = \sum_{k,l} \big|a_k\big\rangle \underbrace{\big\langle b_k\big|b_l\big\rangle}_{=\delta(k,l)} \big\langle a_l\big| = \sum_{k} \big|a_k\big\rangle\big\langle a_k\big| = 1 \,,$$
$$U_{ba}U_{ab} = \sum_{k,l} \big|b_k\big\rangle\big\langle a_k\big|a_l\big\rangle\big\langle b_l\big| = 1 \,. \tag{1.13.2}$$

したがって次のようになる．

$$U_{ab}^{\dagger} = U_{ba} = U_{ab}^{-1} \,, \quad U_{ba}^{\dagger} = U_{ab} = U_{ba}^{-1} \,. \tag{1.13.3}$$

またベクトルは以下のように変換される．

$$\big\langle a_k\big|U_{ab} = \big\langle b_k\big| \,, \qquad U_{ab}\big|b_k\big\rangle = \big|a_k\big\rangle \,,$$
$$\big\langle b_k\big|U_{ba} = \big\langle a_k\big| \,, \qquad U_{ba}\big|a_k\big\rangle = \big|b_k\big\rangle \,. \tag{1.13.4}$$

U 記号は正規直交系を成すベクトルに作用，つまり演算し別の正規直交系を作る．これらの変換は以下のユニタリー幾何の**計量関係**を保っている．

$$\big\langle b_k\big|b_l\big\rangle = \big\langle a_k\big|U_{ab}U_{ba}\big|a_l\big\rangle = \big\langle a_k\big|a_l\big\rangle = \delta_{kl} \,. \tag{1.13.5}$$

したがってユニタリー演算子と呼ばれる．実際，演算子という用語は観測代数のすべての要素 X に対しても適用される．

$$X = \sum_{a',a''} \big\langle a'\big|X\big|a''\big\rangle\big|a'a''\big| \,. \tag{1.13.6}$$

これはあるベクトルに演算して，別のベクトル（ただし同種類）を生成すると考えられる．

$$\big\langle a'\big|X = \sum_{a''} \big\langle a'\big|X\big|a''\big\rangle\big\langle a''\big| \,,$$
$$X\big|a''\big\rangle = \sum_{a'} \big|a'\big\rangle\big\langle a'\big|X\big|a''\big\rangle \,. \tag{1.13.7}$$

「演算子」という用語は，しばしば「観測記号」と同意語として用いられる．たとえばパウリ演算子について話したときにそのように扱ってきた．特に以下のエルミート演算子

$$A = \sum |a'\rangle a' \langle a'| \tag{1.13.8}$$

が a で指定されるベクトルに演算すると，（すでに知っているように）同じベクトルにある数値を掛けたものとなる．

$$\langle a'|A = a'\langle a'| \,, \quad A|a'\rangle = |a'\rangle a' \,. \tag{1.13.9}$$

このようなベクトルは演算子の固有ベクトルと呼ばれる．またそれに対応して数値 a' は固有値と呼ばれる．

物理量 B に対応するエルミート演算子 B は以下のように書かれ，

$$\begin{aligned} B &= \sum_k |b_k\rangle b_k \langle b_k| \\ &= \sum_k U_{ba}|a_k\rangle a_k \langle a_k|U_{ab} \\ &= U_{ba}AU_{ab} \end{aligned} \tag{1.13.10}$$

U_{ab} をどのように A に演算して B を作るかを示している．

b で指定されるベクトル全体は a で指定されるベクトルでたとえば次のように書かれる．

$$|b_l\rangle = \sum_k |a_k\rangle\langle a_k|b_l\rangle \,. \tag{1.13.11}$$

ここで n^2 個の数の組 $\langle a_k|b_l\rangle$ は方向余弦の一般化であり，ab 変換関数と呼ばれる．これは数学用語である．物理的には確率振幅であり波動関数である．これらはまた以下のように行列要素である．

$$\langle a_k|b_l\rangle = \langle a_k|U_{ba}|a_l\rangle \,. \tag{1.13.12}$$

次のシュテルン・ゲルラッハの実験の例について示してみよう．

$$A = \sigma_z \,, \quad B = \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{n} \,, \quad U_{ba} = U_{ab}^{-1} = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi\,\sigma_z}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\vartheta\,\sigma_y} \,. \tag{1.13.13}$$

したがって

$$\begin{aligned} \langle\sigma_z'|\sigma_n''\rangle &= \langle\sigma_z'|\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi\,\sigma_z}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\vartheta\,\sigma_y}|\sigma_z'' = \sigma_n''\rangle \,, \\ &= \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi\,\sigma_z'}\langle\sigma_z'|\left(\cos\frac{\vartheta}{2} - \mathrm{i}\sigma_y\sin\frac{\vartheta}{2}\right)|\sigma_z''\rangle \end{aligned}$$

$$\sigma_z' \backslash \sigma_n'' = \sigma_z''$$

$$= \begin{pmatrix} \cos\frac{\vartheta}{2}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi} & -\sin\frac{\vartheta}{2}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi} \\ \sin\frac{\vartheta}{2}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi} & \cos\frac{\vartheta}{2}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\varphi} \end{pmatrix} \,. \tag{1.13.14}$$

この行列の 1 列目が波動関数 $\psi_{\sigma_n=+1}(\sigma'_z)$ であり，2 列目が $\psi_{\sigma_n=-1}(\sigma'_z)$ となり，これは式(1.12.6)と一致する．

1.14　ユニタリー演算子の基底と相補性

今までのところ，物理的にはただ 1 つの例，つまりシュテルン・ゲルラッハの実験での 2 通りの値をとる磁気モーメントしかなかった．この出発点となったことをさらに発展させていこう．そこで一見それほど面白いとは思われない問題を吟味することから話を進めていこう．

ユニタリー演算子は，1 つの正規直交ベクトルの集合を別の集合とか同じ集合に変換する．単位記号は確かにユニタリー演算子である．

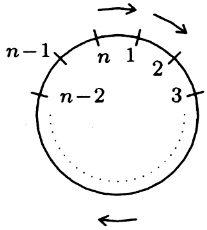
$$1^\dagger 1 = 11 = 1\,. \tag{1.14.1}$$

そして実際以下のようになる．

$$\langle a'|1 = \langle a'|\,,\quad 1|a'\rangle = |a'\rangle\,. \tag{1.14.2}$$

さてここで，ある a で指定されるベクトルの集合を，同じ集合だが，$a_1, a_2, \ldots, a_n$ と付けられている順序を異なる順序にするユニタリー変換，たとえば以下のような巡回的に置換するユニタリー演算子について考えてみよう．

$$U|a_k\rangle = |a_{k+1}\rangle\,,\qquad U|a_n\rangle = |a_1\rangle\,. \tag{1.14.3}$$



これの最も簡単な例は σ_x である．

$$\sigma_x|-\rangle = |+\rangle\,,\quad \sigma_x|+\rangle = |-\rangle\,. \tag{1.14.4}$$

この例では，繰り返しが単位，つまり $\sigma_x^2 = 1$ となる．さて一般には

$$U^2|a_k\rangle = U|a_{k+1}\rangle = |a_{k+2}\rangle \tag{1.14.5}$$

だから，以下のようになる．

$$U^n|a_k\rangle = |a_{k+n}\rangle = |a_k\rangle\,. \tag{1.14.6}$$

ここで添え字 k は以下のように n を法として解することとする．

$$
\begin{aligned}
n+1 \;\hat{=}\;& n+1\ (\mathrm{mod}\ n) &= 1\,,\\
n+2 \;\hat{=}\;& n+2\ (\mathrm{mod}\ n) &= 2\,,\\
&\text{等}. &
\end{aligned}
\tag{1.14.7}
$$

以上より次のようになる.

$$U^n = 1\,. \tag{1.14.8}$$

ここで n は U の周期と呼ばれる．上記の関係式(1.14.8)を満たす数値 u' について考えてみよう.

$$(u')^n = 1\,, \quad u' = \mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}\frac{k}{n}}\,; \qquad k = 1, 2, \ldots, n\,. \tag{1.14.9}$$

これらの u' は1の異なる n 乗根である(たとえば $n=2$ に対しては異なる2個の根 $u' = \mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}\frac{1}{2}} = -1$ と $\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}\frac{2}{2}} = 1$ となる)．演算子としての U は以下の代数方程式を満たす.

$$U^n - 1 = \prod_{k=1}^{n}(U - u_k) = 0 \quad \text{ただし} \quad u_k = \mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}\frac{k}{n}}\,. \tag{1.14.10}$$

さて $U^n - 1$ をある因子 $U - u_k$ と残りの部分に因数分解することは以下のようにしてできる.

$$U^n - 1 = (U/u_k)^n - 1 = (U/u_k - 1)\sum_{l=0}^{n-1}(U/u_k)^l\,. \tag{1.14.11}$$

ここでよく知られた次の関係式を使った.

$$(X-1)\left(1 + X + X^2 + \ldots X^{n-1}\right) = X^n - 1\,. \tag{1.14.12}$$

この結果は $l=0$ の項は $l=n$ と等しいことから，以下のようにも書ける.

$$(U - u_k)\sum_{l=1}^{n}(U/u_k)^l = \sum_{l=1}^{n}(U/u_k)^l\,(U - u_k) = 0\,. \tag{1.14.13}$$

これより U の測定で値 u_k を生じる観測記号は次の式のように書ける.

$$\left|u_k u_k\right| = \frac{1}{n}\sum_{l=1}^{n}(U/u_k)^l\,. \tag{1.14.14}$$

確かに $U \to u_k$ においては $\left|u_k u_k\right| \to 1$ となっている.

これがエルミート演算子であることに注目しておくのは重要なことである.

$$
\begin{aligned}
\left|u_k u_k\right|^\dagger &= \frac{1}{n}\sum_{l}\left(U^\dagger/u_k^*\right)^l = \frac{1}{n}\sum_{l}(U/u_k)^{-l}\\
&= \frac{1}{n}\sum_{l=0}^{n-1}(U/u_k)^{n-l} = \frac{1}{n}\sum_{l=1}^{n}(U/u_k)^l\\
&= \left|u_k u_k\right|\,.
\end{aligned}
\tag{1.14.15}
$$

ここでの代数はエルミート演算子を扱う場合とまったく同様であり，また実際にユニタリー演算子は，$e^{\frac{i}{2}\varphi\sigma_z}$ のようにエルミート演算子の複素数の関数と考えることができるのは明らかである．

ここで以下の関係式

$$|u_k\rangle\langle u_k|a_n\rangle = \frac{1}{n}\sum_{l=1}^{n} u_k^{-l}\underbrace{U^l|a_n\rangle}_{=|a_l\rangle} \tag{1.14.16}$$

を使うと次の結果を得る．

$$\langle a_n|u_k\rangle\langle u_k|a_n\rangle = |\langle u_k|a_n\rangle|^2 = \frac{1}{n}u_k^{-n} = \frac{1}{n}\,. \tag{1.14.17}$$

これより $\langle u_k|a_n\rangle = 1/\sqrt{n}$ とすると以下の関係式を得る．

$$|u_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\sum_{l=1}^{n}|a_l\rangle\, e^{-\frac{2\pi i}{n}kl} \tag{1.14.18}$$

$$\langle u_k| = \frac{1}{\sqrt{n}}\sum_{l=1}^{n} e^{\frac{2\pi i}{n}kl}\langle a_l| \tag{1.14.19}$$

$$\langle u_k|a_l\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\, e^{\frac{2\pi i}{n}kl}\,; \quad = \frac{1}{\sqrt{n}} \qquad (l = n \text{ のとき})\,. \tag{1.14.20}$$

さてこのようにして n 個の別の正規直交ベクトルの集合が得られたので，次にこれらを巡回的に置換する第 2 のユニタリー演算子 V について考えてみよう．

$$\begin{aligned}\langle u_k|V &= \langle u_{k+1}|\,,\\ \langle u_k|V^2 &= \langle u_{k+2}|\,,\\ &\vdots\\ \langle u_k|V^m &= \langle u_{k+m}|\,,\\ &\vdots\\ \langle u_k|V^n &= \langle u_k|\,.\end{aligned} \tag{1.14.21}$$

同様に以下の結果が得られ

$$V^n = 1 \quad \text{および} \quad v_l = e^{2\pi i\frac{l}{n}}\,, \quad l = 1,\ldots,n \tag{1.14.22}$$

観測記号は以下のように書ける．

$$|v_l v_l| = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n}(V/v_l)^k\,. \tag{1.14.23}$$

以上の結果より

$$\langle u_n|v_l\rangle\langle v_l| = \frac{1}{n}\sum_{k=1}^{n} \mathrm{e}^{-\frac{2\pi \mathrm{i}}{n}kl}\langle u_k| \tag{1.14.24}$$

となり，また $|\langle u_n|v_l\rangle|^2 = 1/n$ なので，$\langle u_n|v_l\rangle = 1/\sqrt{n}$ ととることで，ベクトルの集合

$$\langle v_l| = \frac{1}{\sqrt{n}}\sum_{k=1}^{n} \mathrm{e}^{-\frac{2\pi \mathrm{i}}{n}kl}\langle u_k| \,,$$

$$|v_l\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\sum_{k=1}^{n}|u_k\rangle\, \mathrm{e}^{\frac{2\pi \mathrm{i}}{n}kl} \tag{1.14.25}$$

が得られる．しかしここで次の関係

$$\frac{1}{\sqrt{n}}\,\mathrm{e}^{\frac{2\pi \mathrm{i}}{n}kl} = \langle u_k|a_l\rangle \tag{1.14.26}$$

を使うと以下のようになる

$$|v_l\rangle = \sum_{k=1}^{n}|u_k\rangle\langle u_k|a_l\rangle = |a_l\rangle\,! \tag{1.14.27}$$

つまりもとのベクトルの集合に戻ったわけである．

このようにして，互いに相補的に定義される以下のような2個のユニタリー演算子を導入できた．

$$U|v_l\rangle = |v_{l+1}\rangle\,, \quad \langle u_k|V = \langle u_{k+1}|\,. \tag{1.14.28}$$

これらのユニタリー演算子は以下の式を満たす．

$$U^n = 1\,, \quad V^n = 1\,. \tag{1.14.29}$$

さらに，たとえば次の関係式

$$\langle u_k|VU = \langle u_{k+1}|U = \mathrm{e}^{\frac{2\pi \mathrm{i}}{n}(k+1)}\langle u_{k+1}|\,,$$

$$\langle u_k|UV = \mathrm{e}^{\frac{2\pi \mathrm{i}k}{n}}\langle u_k|V = \mathrm{e}^{\frac{2\pi \mathrm{i}}{n}k}\langle u_{k+1}|\,, \tag{1.14.30}$$

より以下の式が得られる．

$$VU = \mathrm{e}^{\frac{2\pi \mathrm{i}}{n}}UV\,. \tag{1.14.31}$$

また互いの内積については

$$\langle u_k|v_l\rangle = \frac{1}{\sqrt{n}}\,\mathrm{e}^{\frac{2\pi \mathrm{i}}{n}kl} \tag{1.14.32}$$

となり，同じ係数が演算子の関係でも現れる．

$$V^lU^k = \mathrm{e}^{\frac{2\pi \mathrm{i}}{n}kl}U^kV^l\,. \tag{1.14.33}$$

この式は，交換を繰り返すか，または以下の関係式と比較して導くことができる．

$$\begin{aligned}\langle u_m|V^lU^k &= \langle u_{m+l}|U^k = \mathrm{e}^{\frac{2\pi\mathrm{i}}{n}k(m+l)}\langle u_{m+l}|\,,\\ \langle u_m|U^kV^l &= \mathrm{e}^{\frac{2\pi\mathrm{i}}{n}km}\langle u_m|V^l = \mathrm{e}^{\frac{2\pi\mathrm{i}}{n}km}\langle u_{m+l}|\,.\end{aligned} \tag{1.14.34}$$

$n=2$ の場合は次のようになる．

$$U^2=1\,,\quad V^2=1\,,\quad UV=-VU\,. \tag{1.14.35}$$

これはまさに σ_x と σ_y（または他のどんな対でも）の持つ性質である．これらエルミート演算子は，$\sigma_x^\dagger\sigma_x=(\sigma_x)^2=1$ だからユニタリーでもある．$n=2$ から $n=\infty$ に持って行くことで，反交換する U と V から交換する U と V に移行していく．通常の数の特徴である交換可能性は**古典物理学**の特徴である．実際，原子物理やそれを記述する量子力学が本質的であるという我々の観点から，古典的極限で認識されている物理的な特徴を導くことになるであろう．

$n=2$ の場合の 4 個の基本演算子は，基本的な U と V の対から U^kV^l, $k,l=1,2$ の形で作られる．

$$\begin{aligned}U^1V^1 &= \sigma_x\sigma_y=\mathrm{i}\sigma_z,\\ U^1V^2 &= \sigma_x,\\ U^2V^1 &= \sigma_y,\\ U^2V^2 &= 1\,.\end{aligned} \tag{1.14.36}$$

一般の n については，U^kV^l $(k,l=1,\ldots,n)$ の形の n^2 個の演算子が作られ，これは観測記号の数と一致している．それでは各々の観測記号を，たとえば $|u'u''|$ を U^kV^l で書くことができるだろうか？ まず次の式から始めてみよう．

$$|u_k\rangle\langle u_k| = \frac{1}{n}\sum_l (U/u_k)^l = \frac{1}{n}\sum_l \mathrm{e}^{-\frac{2\pi\mathrm{i}}{n}kl}U^l\,. \tag{1.14.37}$$

これに右から V^{m-k} を掛けると以下のようになる．

$$|u_ku_m| = \frac{1}{n}\sum_l \mathrm{e}^{-\frac{2\pi\mathrm{i}}{n}kl}U^lV^{m-k}\,. \tag{1.14.38}$$

この式は $m<k$ に対しても，たとえば $V^{-1}=V^{n-1}$ であることを考慮すれば適用できる．これより n^2 個の観測記号 $|u'u''|$ の線形結合で書ける演算子 F は次のように n^2 のユニタリー演算子 U^kV^l の線形結合ともなる．

$$F=\sum_{k,l=1}^{n} f_{kl}U^kV^l = f(U,V)\,. \tag{1.14.39}$$

これは基本的な対である U と V の関数である．

U と V をエルミート演算子で書かれる2個の物理量の複素数値関数と考えることもできるが，U と V を扱う方がより直接的である．U の観測において u' の値を持つと選択された原子に対して，V の観測において結果が v' となる確率 $p(u',v')$ は，$u'=u_k, v'=v_l$ として以下のようになる．

$$p(u',v') = \left|\frac{1}{\sqrt{n}}\,\mathrm{e}^{\frac{2\pi\mathrm{i}}{n}kl}\right|^2 = \frac{1}{n}\,. \tag{1.14.40}$$

この結果は u' と v' という値の選択に依存しない．このような U と V についての統計的な性質は，以下のような非選択的な観測を考えればもっとはっきりする．結果は

$$p(u',v,u'') = \sum_{v'} p(u',v')p(v',u'') = \sum_{v'} \frac{1}{n}\frac{1}{n} = \frac{1}{n} \tag{1.14.41}$$

のようになり，次式の観測を行わない場合とはまったく異なる．

$$p(u',1,u'') = p(u',u'') = \delta(u',u'')\,. \tag{1.14.42}$$

つまり V を観測することで最初の値が u' であったという情報が完全に失われ，すべての値が同じ確率で生じるのである．

観測が互いに影響し合う物理的な量は非両立と呼ばれる．ここでの U と V は**最大**の非両立性を示している．このこと，および U と V の両方が系の記述に必要であるという事実は，U と V は**相補的**な性質であるという言葉で表現される．両者が必要とされるが，一方の観測は，他方の以前のいかなる情報をも一掃してしまう．これがまさにボーア*の相補性(1927)なのである．すべての量子的な対象は互いに排他的な性質を持たなければならない．これが量子力学なのである．

ここで U と V の関数である演算子 F のトレースを求めるよい方法について示そう．式(1.14.39)の u' 行と v' 列の行列要素をとると

$$\langle u'|F|v'\rangle = \langle u'|\sum_{k,l} f_{kl}U^kV^l|v'\rangle = f(u',v')\langle u'|v'\rangle \tag{1.14.43}$$

となるので，トレースは次のようになる．

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}\,\{F\} &= \sum_{u'}\langle u'|F|u'\rangle = \sum_{u',v'}\langle u'|F|v'\rangle\langle v'|u'\rangle \\ &= \sum_{u',v'} f(u',v')\left|\langle u'|v'\rangle\right|^2\,. \end{aligned}\tag{1.14.44}$$

これは以下のようにも書ける．

$$\mathrm{tr}\,\{f(U,V)\} = \frac{1}{n}\sum_{u',v'} f(u',v')\,. \tag{1.14.45}$$

---

*Niels Henrik David BOHR (1885–1962)

もし F がある物理量であるか，またはその関数であれば

$$F = \sum_{f'} |f'\rangle f' \langle f'| \tag{1.14.46}$$

のように書け，$\mathrm{tr}\left\{|f'f'|\right\} = 1$ であることから，次のようになる．

$$\mathrm{tr}\{F\} = \sum_{f'} f' \,. \tag{1.14.47}$$

したがって以下の結果を得る．

$$\sum_{f'} f' = \frac{1}{n} \sum_{u',v'} f(u',v') \,. \tag{1.14.48}$$

つまり，$f(U,V)$ のすべての物理的な値の和は，U と V に対する値を独立に指定された数 $f(u',v')$ の総和で与えられる．これが**エルゴード定理**である．

さて，トレースの計算の準備として，以下の関係に注意しよう．

$$\begin{aligned}\sum_l \langle u_k | v_l \rangle \langle v_l | u_m \rangle = \delta_{km} &= \frac{1}{n} \sum_l \mathrm{e}^{\frac{2\pi \mathrm{i}}{n} kl}\, \mathrm{e}^{-\frac{2\pi \mathrm{i}}{n} lm} \\ &= \frac{1}{n} \sum_l \left(\mathrm{e}^{\frac{2\pi \mathrm{i} l}{n}} \right)^{k-m} \,. \end{aligned} \tag{1.14.49}$$

つまり，以下の式が成り立つ．

$$\frac{1}{n} \sum_{u'} (u')^r = \begin{cases} 1 & (r = 0)\,, \\ 0 & (0 < r < n)\,. \end{cases} \tag{1.14.50}$$

これはまさに 1 の n 乗根，$u_k = \mathrm{e}^{\frac{2\pi \mathrm{i}}{n} k}$ の性質である．さてここで以下のトレースを考えよう．

$$\mathrm{tr}\left\{U^k V^l\right\} = \frac{1}{n} \sum_{u',v'} (u')^k (v')^l \,. \tag{1.14.51}$$

明らかに $k = l = n$ に対しては，式(1.11.9)で示したように

$$\mathrm{tr}\{1\} = n \tag{1.14.52}$$

となる．しかしこれ以外の，以下の

$$\underbrace{k = 1, \ldots, n-1 \quad \text{または} \quad l = 1, \ldots, n-1}_{n^2 - 1\ \text{個}} \tag{1.14.53}$$

に対しては，トレースは

$$\mathrm{tr}\left\{U^k V^l\right\} = 0 \tag{1.14.54}$$

となる．これは式(1.11.7)における $n = 2$ の場合の一般化である．

1.15　量子自由度

n が $n=2,3,4,\dots$ のそれぞれに応じて相補的な量の異なる対，つまり異なる物理系を得る．しかし $n=4=2\times 2$ とか $n=6=2\times 3$ など，一般的に $n=n_1n_2$ の場合は，n_1 と n_2 で特徴付けられるより簡単な2個の系の複合系と考えることができる．まず以下のような場合について考えてみよう．

$$U_1=U^{n_2}\,,\qquad U_2=U^{n_1}\,,$$
$$V_1=V^{l_1n_2}\,,\qquad V_2=V^{l_2n_1}\,. \tag{1.15.1}$$

ここで l_1 と l_2 は以下の関係式，

$$U_1^{n_1}=U^n=1\,,\qquad U_2^{n_2}=U^n=1\,,$$
$$V_1^{n_1}=V^{l_1n}=1\,,\qquad V_2^{n_2}=V^{l_2n}=1\,, \tag{1.15.2}$$

そしてたとえば U と V の積，

$$V_1U_2=V^{l_1n_2}U^{n_1}=\mathrm{e}^{\frac{2\pi\mathrm{i}}{n}l_1n}U_2V_1=U_2V_1 \tag{1.15.3}$$

および次の式を満たす整数とする．

$$V_1U_1=V^{l_1n_2}U^{n_2}=\mathrm{e}^{\frac{2\pi\mathrm{i}}{n}l_1n_2^2}U_1V_1=\mathrm{e}^{\frac{2\pi\mathrm{i}}{n_1}}U_1V_1\,. \tag{1.15.4}$$

ただし $l_1n_2=1\,(\mathrm{mod}\ n_1)$ とする．n_1 と n_2 に共通の因子がなければ，l_1 と l_2 は一意的に決まる．たとえば $n_1=2$, $n_2=3$ ならば，$l_1=1$, $l_2=2$ となる．しかしこの選択は，たとえば $4=2\times 2$ の場合は適用できない．その代わりに以下のように議論を進めていこう．順序付けを $k=1,\dots,n$ とする代わりに，長方形に並べて順序付けよう．

$$\begin{array}{lcccc}
k_1\backslash k_2 & & & & \\
& 1,1 & 1,2 & \dots & 1,n_2 \\
& 2,1 & 2,2 & \dots & 2,n_2 \\
& \vdots & \vdots & & \vdots \\
& n_1,1 & 1,2 & \dots & n_1,n_2\,.
\end{array} \tag{1.15.5}$$

ここで $n_1n_2=n$ 個は n_1 行と n_2 列の行列の成分 k_1,k_2 の対で区別している．そうすると，演算子 U_1,V_1 を行を巡回させる演算子，そして U_2,V_2 をそれとは独立な列を巡回させる演算子として導入できる．以下の根

$$u_{1k_1}=\mathrm{e}^{\frac{2\pi\mathrm{i}}{n_1}k_1}=v_{1k_1}\,;\quad u_{2k_2}=\mathrm{e}^{\frac{2\pi\mathrm{i}}{n_2}k_2}=v_{2k_2} \tag{1.15.6}$$

を使うと V に対して

$$\langle u_{1k_1}, u_{2k_2} | V_1 = \langle u_{1k_1+1}, u_{2k_2} | ,$$
$$\langle u_{1k_1}, u_{2k_2} | V_2 = \langle u_{1k_1}, u_{2k_2+1} | \tag{1.15.7}$$

となり，また U に対しては，次のように独立に相補的な定義ができる．

$$U_1 | v_{1k_1}, v_{2k_2} \rangle = | v_{1k_1+1}, v_{2k_2} \rangle ,$$
$$U_2 | v_{1k_1}, v_{2k_2} \rangle = | v_{1k_1}, v_{2k_2+1} \rangle . \tag{1.15.8}$$

U_1, V_1 および U_2, V_2 のそれぞれの組に対して，以前と同様に以下の関係式が成り立つ．

$$U_1^{n_1} = V_1^{n_1} = 1 , \qquad U_2^{n_2} = V_2^{n_2} = 1 ,$$
$$V_1 U_1 = \mathrm{e}^{\frac{2\pi \mathrm{i}}{n_1}} U_1 V_1 , \qquad V_2 U_2 = \mathrm{e}^{\frac{2\pi \mathrm{i}}{n_2}} U_2 V_2 . \tag{1.15.9}$$

演算子 U_1, V_1 はベクトルの一方の添え字に，演算子 U_2, V_2 は他方の添え字に演算する．この 2 組の異なる演算子が演算する場合，順序は問題ではない．たとえば以下のようになり

$$\langle u_{1k_1}, u_{2k_2} | U_1 V_2 = u_{1k_1} \langle u_{1k_1}, u_{2k_2} | V_2 = u_{1k_1} \langle u_{1k_1}, u_{2k_2+1} | ,$$
$$\langle u_{1k_1}, u_{2k_2} | V_2 U_1 = \langle u_{1k_1}, u_{2k_2+1} | U_1 = u_{1k_1} \langle u_{1k_1}, u_{2k_2+1} | \tag{1.15.10}$$

次の関係が成り立つ．

$$U_1 U_2 = U_2 U_1 , \qquad V_1 V_2 = V_2 V_1 ,$$
$$U_1 V_2 = V_2 U_1 , \qquad V_1 U_2 = U_2 V_1 . \tag{1.15.11}$$

一方の観測が他方のそれまでの情報を変えない，つまり観測の順序が問題ではない 2 つの物理量は，それに対応する互いに交換する観測記号で表され，互いに両立であると呼ばれる．演算子対 U_1, V_1 は演算子対 U_2, V_2 と両立である． U_1, V_1 と U_2, V_2 を，個々にどの順序ででも生成されたり消滅させられたりする，2 つの独立な系と考えるのが有用な見方である．すると

$$\langle u_1', u_2' | = \langle u_1' | \langle u_2' | = \langle u_2' | \langle u_1' | ,$$
$$| v_1'', v_2'' \rangle = | v_1'' \rangle | v_2'' \rangle = | v_2'' \rangle | v_1'' \rangle \tag{1.15.12}$$

および

$$\langle u_1', u_2' | v_1'', v_2'' \rangle = \langle u_1' | v_1'' \rangle \langle u_2' | v_2'' \rangle \tag{1.15.13}$$

が成立する．後半は具体的には次のように書ける．

$$\langle u_{1k_1}, u_{2k_2} | v_{1l_1}, v_{2l_2} \rangle = \frac{1}{\sqrt{n_1}} \mathrm{e}^{\frac{2\pi \mathrm{i}}{n_1} k_1 l_1} \frac{1}{\sqrt{n_2}} \mathrm{e}^{\frac{2\pi \mathrm{i}}{n_2} k_2 l_2}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{n}} \mathrm{e}^{2\pi \mathrm{i} (k_1 l_1 / n_1 + k_2 l_2 / n_2)} . \tag{1.15.14}$$

これは $\langle u_{1k_1}, u_{2k_2}|$ を $\langle u_{1k_1}|v_{1l_1}\rangle$ を係数として $\langle v_{1l_1}, u_{2k_2}|$ で書き，それから $\langle v_{1l_1}, u_{2k_2}|$ を $\langle u_{2k_2}|v_{2l_2}\rangle$ を係数とする $\langle v_{1l_1}, v_{2l_2}|$ で書くことで直接出てくる．

両立および非両立な物理量についての以上の考察は，今まで明確にされなかった事柄に直接注意を向けさせる．我々は1つの物理量の観測から話を始めた．しかしながら一般的には，このような物理量 A_1 に対して，別の両立できる量 A_2 を加えることができる．これら2個の量の選択的観測は以下の記号で表される．

$$|a_1'a_1'||a_2'a_2'| = |a_2'a_2'||a_1'a_1'| \,. \tag{1.15.15}$$

これを続けることで，両立する物理量から成る**完全**な集合 $A_1, A_2, \ldots, A_{K(A)}$ に達する．これ以外の物理量はこれらの少なくとも1つとは非両立である．このような完全測定の観測記号は以下で与えられる．

$$\underbrace{|a_1'a_1'|\ldots|a_{K(A)}'a_{K(A)}'|}_{\text{順序は任意}} = |a'a'| \qquad ここで \quad a' \equiv \left\{a_1', a_2', \ldots, a_{K(A)}'\right\} \,. \tag{1.15.16}$$

ある特定の値 a' を持つように選択された原子は，**状態** a' にあると呼ばれる．

これより観測の代数とその幾何学の完全な構成は以前と同じように進められる．唯一の差は観測結果が1つの数ではなくいくつかの数値の集まりである点である．このようにして

$$\sum_{a'}|a'a'| = 1 \,, \quad |a'a'| = |a'\rangle\langle a'| \tag{1.15.17}$$

および

$$\langle a'|a''\rangle = \delta(a', a'') = \prod_{j=1}^{K(A)} \delta(a_j', a_j'') \tag{1.15.18}$$

が成立する．

さてここで，逆に完全な観測からある1つの物理量の観測記号を作ってみよう．これは次のようになる．

$$|a_1'a_1'| = \sum_{a_2', \ldots, a_{K(A)}'} |a'a'| \,. \tag{1.15.19}$$

なぜなら A_1 が a_1' の値を持つ原子を選択するのは，a_1' とさらに a_2', a_3', …, $a_{K(A)}'$ の**任意**の値を選択する完全な観測よりは選択度が低いからである．もちろん

$$\sum_{a_1'}|a_1'a_1'| = \sum_{a'}|a'a'| = 1 \tag{1.15.20}$$

であり，またたとえば観測量 A_1 は以下のようになる．

$$A_1 = \sum_{a_1'} a_1'|a_1'a_1'| = \sum_{a'}|a'\rangle a_1'\langle a'| \,. \tag{1.15.21}$$

ここで $|a_1'a_1'|$ はベクトルの単純な積ではないことに注意しよう．このことは次の式

$$\mathrm{tr}\left\{|a'a'|\right\} = \mathrm{tr}\left\{|a'\rangle\langle a'|\right\} = \langle a'|a'\rangle = 1 \tag{1.15.22}$$

および

$$\mathrm{tr}\left\{|a_1'a_1'|\right\} = \mathrm{tr}\left\{\sum_{a_2',\ldots,a'_{K(A)}} |a'\rangle\langle a'|\right\} = \sum_{a_2',\ldots,a'_{K(A)}} 1 = m(a_1') \tag{1.15.23}$$

を対比させればはっきりする．ここで $m(a_1')$ は数値 a_1' を持つ状態 a' の数で，a_1' の多重度である．また結果として演算子 A_1 については以下の結果を得る．

$$\mathrm{tr}\left\{A_1\right\} = \sum_{a_1'} a_1' m(a_1') = \sum_{a'} a_1' \,. \tag{1.15.24}$$

もちろん，別の一般的には $A_1, A_2, \ldots$ とは両立しない物理量 B_1 から出発することも可能である．そしてそれに両立する量を補っていき，数値 b' とベクトル $\langle b'|$, $|b'\rangle$ で完全な集合 B を作る．互いに非両立である A と B の集合で共通なものは状態の総数，つまり幾何の次元である．これは次のように別々の計算で示すことができる．

$$\left.\begin{aligned} \sum_{a'}\sum_{b'}\langle a'|b'\rangle\langle b'|a'\rangle = \sum_{a'} 1 = n(A) \\ \sum_{b'}\sum_{a'}\langle b'|a'\rangle\langle a'|b'\rangle = \sum_{b'} 1 = n(B) \end{aligned}\right\} = n \,. \tag{1.15.25}$$

このことはより数学的には固有値問題において現れる．ベクトル $|a'\rangle$ で張られる n 次元空間を考えよう．ここでエルミート演算子 B_1 が与えられたとして，これの固有値と固有ベクトルを見つけよう．つまり以下の式を解いてみよう．

$$B_1|\ \rangle = |\ \rangle b_1' \,. \tag{1.15.26}$$

a で張られる正規直交系を導入して，次の連立方程式を得る．

$$\sum_{a''}\langle a'|B_1|a''\rangle\psi(a'') = \psi(a')b_1' \tag{1.15.27}$$

ここで固有ベクトルの成分を以下のように記した．

$$\langle a'|\ \rangle = \psi(a') \,. \tag{1.15.28}$$

上記の式を

$$\sum_{a''}\left[\langle a'|B_1|a''\rangle - b_1'\delta(a',a'')\right]\psi(a'') = 0 \tag{1.15.29}$$

の形に書くと，

$$\det\left[\langle a'|B_1|a''\rangle - b_1'\delta(a',a'')\right] = 0 \tag{1.15.30}$$

でなければ $\psi(a'')=0$ 以外の解を持たないことはよく知られている．この式は具体的に書くと次のようになる．

$$\det\begin{bmatrix} \langle a_1|B_1|a_1\rangle - b'_1 & \cdots & \langle a_1|B_1|a_n\rangle \\ \vdots & & \vdots \\ \langle a_n|B_1|a_1\rangle & \cdots & \langle a_n|B_1|a_n\rangle - b'_1 \end{bmatrix} = 0\,. \tag{1.15.31}$$

これは b'_1 に対する n 次方程式である．

$$(-b'_1)^n + (-b'_1)^{n-1}\mathrm{tr}\,\{B_1\} + \cdots + \det B_1 = 0\,. \tag{1.15.32}$$

たとえば簡単な例として $n=2$，$B_1=\sigma_x$，$A=\sigma_z$ とすると

$$\begin{aligned}\det\begin{bmatrix} -b'_1 & 1 \\ 1 & -b'_1 \end{bmatrix} &= (-b'_1)^2 + (-b'_1)\underbrace{\mathrm{tr}\,\{\sigma_x\}}_{=0} + \underbrace{\det\sigma_x}_{=-1} \\ &= {b'_1}^2 - 1 = 0 \end{aligned} \tag{1.15.33}$$

となり，この解は $b'_1=\pm1$ となる．

ここである根 b'_1 が得られたとすると，$\psi(a'')$ に対する線形の方程式より，定数を除いて答が求まる．そしてさらに位相の任意性を除くと以下の規格化の条件で解は決定される．

$$\sum_{a'}\left|\psi_{b'_1}(a')\right|^2 = 1\,. \tag{1.15.34}$$

ここで根が異なる場合，つまり異なる固有値に対する固有ベクトルは直交している．これは次式

$$\langle b'_1|B_1|b''_1\rangle = b'_1\langle b'_1|b''_1\rangle = \langle b'_1|b''_1\rangle b''_1 \tag{1.15.35}$$

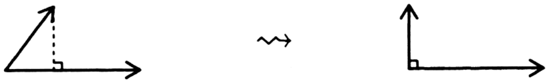
つまり

$$(b'_1 - b''_1)\langle b'_1|b''_1\rangle = 0 \tag{1.15.36}$$

よりわかる．したがって次のようにまとめられる．

$$b'_1 \neq b''_1:\quad \langle b'_1|b''_1\rangle = \sum_{a'}\psi_{b'_1}(a')^*\psi_{b''_1}(a') = 0\,. \tag{1.15.37}$$

さて仮に n 個のすべての根が異なるのではなく，いくつかは重根であったとしよう．たとえば $n=4$ で B_1 が $B_1^2=1$ を満たすとする．すると固有値は $+1$，-1 の 2 つだけであり，行列式は $(b'-1)^2(b'+1)^2$ となり，どちらか，または両方とも重根でなければならない．根 b'_1 の多重度を $m(b'_1)=2,3,\ldots$ とすると，式(1.15.27)は $m(b'_1)$ 個の線形独立な解を持つ．これらのベクトル $|b'_1,1\rangle,\ldots,|b'_1,m(b'_1)\rangle$ は自動的に直交はしていないが，下図の 2 次元のユークリッド空間で示されているように，射影によって直交化させることができる．



以上より $|b'_1, l\rangle$, $l = 1, \dots, m(b'_1)$ で張られる正規直交系が得られる．次に B_1 と交換する，つまり $B_1B_2 = B_2B_1$ である 2 つ目の演算子 B_2 を見つけよう．すると

$$B_1B_2|b'_1, l\rangle = B_2B_1|b'_1, l\rangle = B_2|b'_1, l\rangle b'_1 \tag{1.15.38}$$

の関係式より，$B_2|b'_1, l\rangle$ は演算子 B_1 の固有値 b'_1 に対する固有ベクトルとなる．したがって $m(b'_1)$ 個のすでに知られているベクトルの線形結合とならなければならない．

$$B_2|b'_1, l\rangle = \sum_{k=1}^{m(b'_1)} |b'_1, k\rangle\langle b'_1, k|B_2|b'_1, l\rangle\,. \tag{1.15.39}$$

ここで行列要素の記法が適切であることは左から $\langle b'_1, k|$ を掛けて見れば明らかであろう．

次に $m(b'_1)$ 次元の空間の範囲内で B_2 の固有ベクトル

$$B_2|b'_1, \ \rangle = |b'_1, \ \rangle b'_2 \tag{1.15.40}$$

を探そう．$\langle b'_1, l|b'_1, \ \rangle = \psi_{b'_1}(l)$ とすると以下のように書ける．

$$\sum_{l=1}^{m(b'_1)} \langle b'_1, k|B_2|b'_1, l\rangle\psi_{b'_1}(l) = \psi_{b'_1}(k)b'_2\,. \tag{1.15.41}$$

これより次の固有値方程式を得る．

$$\det\left[\langle b'_1, k|B_2|b'_1, l\rangle - \delta(k, l)b'_2\right] = 0\,. \tag{1.15.42}$$

もしこの方程式の根がすべて異なれば正規直交系を成すベクトル $|b'_1, b'_2\rangle$ が得られる．もしそうでなければ B_1，B_2 と交換する 3 番目の B_3 を見つけ，同様の議論を続けていけばよい．

演算子 U, V はこの議論をうまく説明している．n 個の状態がある系では，2 個のエルミート演算子は，$U^n = V^n = 1$ で固有値が $k = 1, \dots, n$ に対して $u_k = v_k = \mathrm{e}^{2\pi \mathrm{i}k/n}$ となる演算子 U と V から暗にわかるように，それぞれ n 個の異なる固有値を持ちすべてのベクトルの多重度は 1 である．この状況では 1 個の演算子 U または V ですでに完全な集合となる．もし n が素数ならこのままである．しかしもし $n = n_1n_2$ ならば，周期が n_1 の演算子 U_1, V_1 とそれらと交換する周期が n_2 の演算子 U_2, V_2 を導入することができる．ここで U_1 または V_1 の固有値の数は $n_1 < n$ だから，多重でなければならない．そして互いに両立な演算子の組でもって完全な集合を作ることができる．その組は U_1, U_2; U_1, V_2; V_1, V_2; V_1, U_2 などで，固有ベクトルとして，$|u_{1k_1}, u_{2k_2}\rangle$, $|u_{1k_1}, v_{2l_2}\rangle$ などが対応する．もし n_1 や n_2 がさらに因数分解できれば，この議論を続けていき，

最終的にはこれ以上分解できない，つまり状態の数が素数 $\nu = 2, 3, 5, 7, 11, 13, \ldots$ である系に到達する．この数を**量子自由度**と呼ぶ．

1.16　連続極限

1.16.1　ハイゼンベルクの交換関係

$\nu = 2$ の場合を除いてすべての量子自由度 ν は奇数である．そこで $u_k = v_k = \mathrm{e}^{(2\pi\mathrm{i}/\nu)k}$ での k を以下のようにとると便利である．

$$k = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots, \pm\frac{\nu - 1}{2}\ . \tag{1.16.1}$$

ここで U と V をエルミート演算子で表そう．以下の ϵ^2 を導入して

$$\frac{2\pi}{\nu} = \epsilon^2 \tag{1.16.2}$$

次のように書く．

$$U = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\epsilon q}\ , \quad V = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\epsilon p}\ , \qquad q' = q_k\ , \quad p' = p_k\ ,$$

$$q_k = p_k = \epsilon k = 0, \pm\epsilon, \pm 2\epsilon, \ldots, \pm\left(\pi/\epsilon - \tfrac{1}{2}\epsilon\right)\ . \tag{1.16.3}$$

以下の関係式

$$V^l U^k = \mathrm{e}^{\frac{2\pi\mathrm{i}}{\nu}kl} U^k V^l \tag{1.16.4}$$

$$V^{-l} U^k V^l = \mathrm{e}^{-\frac{2\pi\mathrm{i}}{\nu}kl} U^k \tag{1.16.5}$$

および

$$U^k V^l U^{-k} = \mathrm{e}^{-\frac{2\pi\mathrm{i}}{\nu}kl} V^l \tag{1.16.6}$$

を思い出して欲しい．これらの関係式は次の式

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}l\epsilon p}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\epsilon q}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}l\epsilon p} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\epsilon l\epsilon}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\epsilon q} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\epsilon(q - l\epsilon)} \tag{1.16.7}$$

および

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\epsilon q}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}l\epsilon p}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\epsilon q} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\epsilon l\epsilon}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}l\epsilon p} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}l\epsilon(p - k\epsilon)} \tag{1.16.8}$$

のように書き直される．ここで $l\epsilon = q'$, $k\epsilon = p'$ とすると，各々は

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}q'p}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'q}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}q'p} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}p'(q - q')} \tag{1.16.9}$$

および

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'q}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}q'p}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p'q} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}q'(p - p')} \tag{1.16.10}$$

となる．

ここで，演算子のベキ級数で定義された関数に対するユニタリー変換について見てみよう．そこで U をどちらかのユニタリー演算子とし，A を演算子 q か p として，次の変換を考えよう．

$$\begin{aligned} U^{-1}A^kU &= U^{-1}AAA\cdots U \\ &= U^{-1}AUU^{-1}AU\cdots \\ &= \left(U^{-1}AU\right)^k . \end{aligned} \tag{1.16.11}$$

これより関数のユニタリー変換は，ユニタリー変換された演算子の関数となる．

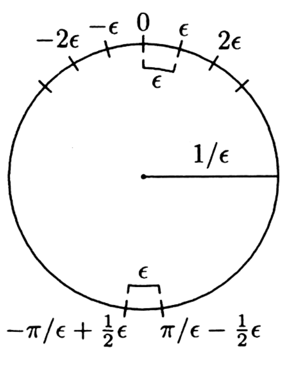
$$U^{-1}f(A)U = f(U^{-1}AU) . \tag{1.16.12}$$

この結果は一般的に，どんな演算子の関数 $f(A)$，およびどんなユニタリー演算子 U に対しても成り立つ．

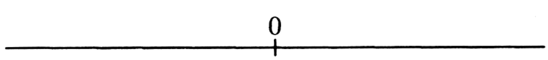
式(1.16.9)および式(1.16.10)の例より以下のようになる．

$$\begin{aligned} \mathrm{e}^{\mathrm{i}p'\left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}q'p}q\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}q'p}\right]} &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}p'(q-q')} , \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}q'\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'q}p\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p'q}\right]} &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}q'(p-p')} . \end{aligned} \tag{1.16.13}$$

ここで両辺の指数関数の指数を等しいとおきたくなるが，これは一般的には指数関数の周期性より正しくない．しかし，正しいと言える極限がある．それは条件付きだが $\nu \to \infty$, $\epsilon \to 0$ の場合である．まず周期性($q_k = p_k = k\epsilon$)を持つ円周を描いてみよう．



$\epsilon \to 0$ つまり $1/\epsilon \to \infty$ の極限においては各部分は 0 も含めて以下の連続的な直線と区別がつかない．



しかし，この直線が連続的に両方向に無限まで伸びても，この両端は最後には一致するという事実を避けるため，q および p はいかなる大きな値もとれるが，有限である

という物理的状況への応用だけに限らなければならない．するとこの状況においては周期性は現れないので，q' と p' の値は連続変数であり指数関数の指数部を等しいとしてよい．したがって以下の結果を得る．

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}q'p}\, q\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}q'p} = q - q' \,,$$
$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'q}\, p\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}p'q} = p - p' \,. \tag{1.16.14}$$

ここで，上式の解釈は後回しにして，べき同士を比較することを可能にした q' と p' の連続性を再び使ってみよう．指数関数を展開して1次までとると次の式

$$\underbrace{(1 - \mathrm{i}q'p + \cdots)\, q\, (1 + \mathrm{i}q'p + \cdots)}_{= q + \mathrm{i}q'(qp - pq) + \cdots} = q - q' \tag{1.16.15}$$

および次の式のようになる．

$$\underbrace{(1 + \mathrm{i}p'q + \cdots)\, p\, (1 - \mathrm{i}p'q + \cdots)}_{= p + \mathrm{i}p'(qp - pq) + \cdots} = p - p' \,. \tag{1.16.16}$$

両式はともに以下のように非可換であるという関係式を与える．

$$qp - pq = \mathrm{i} \qquad \text{または} \qquad \frac{1}{\mathrm{i}}[q, p] = 1 \,. \tag{1.16.17}$$

これが1925年にハイゼンベルク*が発見した非可換性の本質である．式(1.16.17)の交換関係による簡潔な定式化に対してはボルン†が実質的に寄与した．

ベクトルに対するユニタリー演算子の作用

$$\langle u_k | V^l = \langle u_{k+l} | \,, \quad U^k | v_l \rangle = | v_{k+l} \rangle \tag{1.16.18}$$

は，次のように表現される．

$$\langle q' | \, \mathrm{e}^{\mathrm{i}q''p} = \langle q' + q'' | \,, \quad \mathrm{e}^{\mathrm{i}p''q} | p' \rangle = | p' + p'' \rangle \,. \tag{1.16.19}$$

ここで式(1.16.2)および(1.16.3)を使い，$k\epsilon = q'$ および $l\epsilon = q''$ とすると

$$\begin{aligned} u_k &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\epsilon(k\epsilon)} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\epsilon q'} \,, \\ V^l &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}(l\epsilon)p} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}q''p} \,, \\ u_{k+l} &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\epsilon(k\epsilon + l\epsilon)} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\epsilon(q' + q'')} \end{aligned} \tag{1.16.20}$$

となる．次の式で $k\epsilon = p''$ および $l\epsilon = p'$ とすると

$$\begin{aligned} U^k &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}(k\epsilon)q} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}p''q} \,, \\ v_l &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\epsilon(l\epsilon)} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\epsilon p'} \,, \\ v_{k+l} &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\epsilon(l\epsilon + k\epsilon)} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\epsilon(p' + p'')} \end{aligned} \tag{1.16.21}$$

---

*Werner HEISENBERG (1901–1976)　†Max BORN (1882–1970)

となる．2.1 節において，$\langle u_k| \to \sqrt{\epsilon}\langle q'|$, および$|v_l\rangle \to |p'\rangle\sqrt{\epsilon}$ となり，他の余計な係数は相殺することがわかるであろう．

以上より，たとえば，ユニタリー演算子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}q''p}$ は演算子 q の左固有ベクトルに演算すると固有値を動かした別の固有ベクトルを生成することがわかる．$\langle q'|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}q''p}$ は q の固有値が $q'+q''$，つまり $q-q''$ の固有値が q' である固有ベクトルであるということは

$$\langle q'|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}q''p}(q-q'') = q'\langle q'|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}q''p} = \langle q'|q\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}q''p} \tag{1.16.22}$$

のように書け，また次のようにも書ける．

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}q''p}(q-q'') = q\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}q''p}\ . \tag{1.16.23}$$

これは式(1.16.14)（ただし $q'' \to q'$）での演算子の関係式である．

q についてある関係式があるときは，類似の関係式が p に対してもあることがわかる．これは（問題 1-43a を参照）$U \to V$, $V \to U^{-1}$ の対称性，または $U = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\epsilon q}$, $V = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\epsilon p}$ を使うと以下のような対称性に起因している．

$$q \to p\,, \quad p \to -q\ . \tag{1.16.24}$$

実際，次のようになり

$$\mathrm{i} = qp - pq \quad\longrightarrow\quad p(-q)-(-q)p = qp - pq \tag{1.16.25}$$

また $q' \to p'$ とすると以下のようになる．

$$\begin{gathered}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}q'p}q\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}q'p} = q - q'\ ,\\ \downarrow \\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}p'q}p\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p'q} = p - p'\ .\end{gathered} \tag{1.16.26}$$

この対応を $\langle q'|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}q''p} = \langle q'+q''|$ に適用すると，$\langle p'|\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p''q} = \langle p'+p''|$ およびそのエルミート共役 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}p''q}|p'\rangle = |p'+p''\rangle$ を得る．

1.16.2 シュレーディンガーの微分演算子表現

さてここで q ベクトルに対する方程式を右ベクトル $|\ \rangle$ を掛けることで，数値で表される式に変換しよう．

$$\langle q'|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}q''p}|\ \rangle = \langle q'+q''|\ \rangle\ . \tag{1.16.27}$$

ここで状態 $|\ \rangle$ は，$\langle q'+q''|\ \rangle$ が q'' の連続的な関数であり，q'' のベキで両辺が以下のように展開できるとする．

$$\langle q'|(1+\mathrm{i}q''p+\cdots)|\ \rangle = \langle q'|\ \rangle + q''\frac{\partial}{\partial q'}\langle q'|\ \rangle + \cdots\ . \tag{1.16.28}$$

これはまた

$$\langle q'|p|\ \rangle = \frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial q'}\langle q'|\ \rangle \tag{1.16.29}$$

のようにも表現できる．このように p の効果を微分演算子で表現することが，シュレーディンガーによる波動方程式の発見(1926)の本質である．

この表現が非可換性と同等であることは以下の式を見れば明らかである．

$$\begin{aligned}\langle q'|(qp-pq)|\ \rangle &= q'\langle q'|p|\ \rangle - \frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial q'}\langle q'|q|\ \rangle \\ &= \left[q'\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial q'} - \frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial q'}q'\right]\langle q'|\ \rangle = \langle q'|\mathrm{i}|\ \rangle\,. \end{aligned} \tag{1.16.30}$$

$q \to p$, $p \to -q$ とすることで，以下の式，

$$\langle p'|q|\ \rangle = \mathrm{i}\frac{\partial}{\partial p'}\langle p'|\ \rangle \tag{1.16.31}$$

および，そのエルミート共役の式

$$\langle\ |q|p'\rangle = \frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial p'}\langle\ |p'\rangle \tag{1.16.32}$$

を得る．式(1.16.29)と

$$\langle q'|f(q)|\ \rangle = f(q')\langle q'|\ \rangle \tag{1.16.33}$$

を組み合わせると，以下の関係式を得る．

$$\langle q'|f(q,p)|\ \rangle = f\left(q', \frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial q'}\right)\langle q'|\ \rangle\,. \tag{1.16.34}$$

ただし，関数 $f(q,p)$ は和と積からできる基本的な構造を持つ関数であるとする．微分演算子による表現が $f(q)$ や p に対すると同様に $f_1(q,p)$ とか $f_2(q,p)$ に対して正しいとすると，和 $f_1(q,p)+f_2(q,p)$ および積 $f_1(q,p)f_2(q,p)$ に対しても正しい．実際

$$\begin{aligned}\langle q'|\,[f_1(q,p)+f_2(q,p)]\,|\ \rangle &= \langle q'|f_1(q,p)|\ \rangle + \langle q'|f_2(q,p)|\ \rangle \\ &= \left[f_1\left(q', \frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial q'}\right) + f_2\left(q', \frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial q'}\right)\right]\langle q'|\ \rangle \end{aligned} \tag{1.16.35}$$

および

$$\begin{aligned}\langle q'|f_1(q,p)f_2(q,p)|\ \rangle &= f_1\left(q', \frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial q'}\right)\langle q'|f_2(q,p)|\ \rangle \\ &= f_1\left(q', \frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial q'}\right) f_2\left(q', \frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial q'}\right)\langle q'|\ \rangle \end{aligned} \tag{1.16.36}$$

が成立する．また p の固有ベクトルに対しても以下のように類似の関係が成立する．

$$\langle p'|f(q,p)|\ \rangle = f\left(\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial p'}, p'\right)\langle p'|\ \rangle ,$$
$$\langle\ |f(q,p)|p'\rangle = f\left(\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial p'}, p'\right)\langle\ |p'\rangle . \tag{1.16.37}$$

問題

1-1 2227° C の炉から気化して，シュテルン・ゲルラッハの装置のスリットを抜けていく銀の原子の 2 乗平均速度はいくらか？

1-2 磁気モーメント $\boldsymbol{\mu}$ に働く磁場 $\boldsymbol{B}$ の作用によるトルク $\boldsymbol{\mu}\times\boldsymbol{B}$ のために原子の角運動量 $\boldsymbol{J}$ は次式にしたがって変化する．

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{J} = \boldsymbol{\mu}\times\boldsymbol{B} .$$

磁気モーメントを $\boldsymbol{\mu}=\gamma\boldsymbol{J}$ として，z 方向の一様な磁場 $\boldsymbol{B}$ をかける．$\boldsymbol{J}$ の成分は時間とともにどう変化するか？ 最初に $J_z=0$ と仮定して，どれだけの時間の後に $\boldsymbol{J}$ は方向を変えるか？ 平均速度を v として，磁場中を進んだ距離 d で表せ．$\gamma = 1.76\times10^7$ および $|\boldsymbol{B}| = B_z = 0.01$ [cgs 単位系] として d を求めよ．

1-3 26 ページにおいて，シュテルン・ゲルラッハの実験の結果の古典的な予測について述べてある．そこでは「銀の原子の磁気モーメントはもちろん均等にすべての方向に分布しており，そのために磁気モーメントの z 成分 μ_z の分布も μ と $-\mu$ の間で一様となる」と述べてある．後半の部分を示せ．

1-4 シュテルン・ゲルラッハの実験は μ_z の可能な値は $\pm\mu$ であることを示している．それでは μ_z^2, μ_x^2, μ_y^2 および

$$\boldsymbol{\mu}^2 = \mu_x^2 + \mu_y^2 + \mu_z^2$$

について測定するとどうなるか？ このことと $\boldsymbol{\mu}$ は空間のある特定の方向を向いているという古典的な描像とはどう対応しているか？

1-5 ある教科書では，観測記号の和 $\left|a'a'\right| + \left|a''a''\right|$, $a'\neq a''$ を定義するために次のように述べている.「これは 2 個の穴のあいたスリットのシュテルン・ゲルラッハの実験である」．この説にコメントせよ．

1-6 次の式 $(a'\neq a'')$ を示せ．

$$\Big[\left|a'a'\right| + \left|a''a''\right|\Big]^2 = \left|a'a'\right| + \left|a''a''\right| .$$

1-7　次の交換子を計算せよ．

$$\Big[\big|a'a''\big|, \big|a'''a^{\mathrm{iv}}\big|\Big] .$$

結果のトレースがゼロであることを確かめよ．なぜそうなのか？

1-8　次のベクトル

$$\big\langle\overline{a'}\big| = \lambda(a')\big\langle a'\big| , \qquad \big|\overline{a''}\big\rangle = \big|a''\big\rangle\,[\lambda(a'')]^{-1}$$

は，任意の数値 $\lambda(a')$ に対して次の関係を満たすことを示せ．

$$\big\langle\overline{a'}\big|\overline{a''}\big\rangle = \delta(a', a'') .$$

また次の式も成立することを示せ．

$$\sum_{a'}\big|\overline{a'}\big\rangle\big\langle\overline{a'}\big| = 1 .$$

同様のことが数 $\lambda(b')$ を用いて，ベクトル $\big\langle b'\big|$ および $\big|b''\big\rangle$ についても適用できる．次の関係が成立するために数 $\lambda(a')$ や $\lambda(b')$ に要求される制限は何か．

$$\big\langle\overline{b'}\big|\overline{a'}\big\rangle = \big\langle\overline{a'}\big|\overline{b'}\big\rangle^* .$$

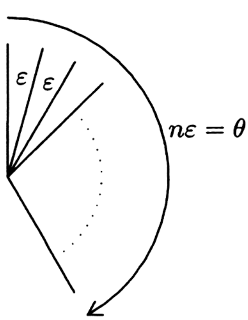
この任意性−定義の自由度−を用いて，$\big\langle a'\big|b'\big\rangle$ がそれ自体では確率とはならず，$\big\langle a'\big|b'\big\rangle\big\langle b'\big|a$ が確率となることを議論せよ．

1-9　38 ページについて：γ を正の実数として，実数である内積に対して明らかにより一般的であると考えられる次の可能性

$$\big\langle b'\big|a'\big\rangle = \gamma\big\langle a'\big|b'\big\rangle , \qquad p(a', b') = \gamma\big[\big\langle a'\big|b'\big\rangle\big]^2$$

は，a ベクトルと b ベクトルを容認可能な再定義をすることに還元できることを示せ．

1-10　シュテルン・ゲルラッハの実験で，まず $+$ のビームを選択する．次に角度 ε だけ異なる方向で $+$ を選択する．3 番目の $+$ の選択はさらに角度 ε だけ異なる方向で行う．このような方向の変更を全体で n 回行い，最後の $+$ の選択を最初の方向から角度 $\theta = n\varepsilon$ だけ異なる方向で行った．$\varepsilon \to 0$ および $n = \theta/\varepsilon \to \infty$ の極限で最初に選択されたビームのうち，どれだけが最後の選択で観測されるか？



1-11　物理量 B の非選択な観測記号 M_b を演算子 B の関数として書け．この M_b は

どのような種類の演算子か？

1-12　物理量 s は3通りの値 $+1, 0, -1$ をとる．s はどのような代数方程式にしたがうか？ 観測記号 $|++|$, $|00|$, $|--|$ を s の関数として表せ．

1-13　次の式

$$(\sigma_x \cos\varphi + \sigma_y \sin\varphi)^2 = 1$$

がすべての角度 φ で成立し，次の関係式

$$\sigma_z = -\mathrm{i}\sigma_x\sigma_y$$

があれば，σ_x, σ_y, σ_z のすべての代数的な性質が得られることを示せ．

1-14　次の式を $(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{b})\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{c}$ および $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}\,(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{b}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{c})$ の2通りの方法で計算せよ．

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{b}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{c}$$

1-15　$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{b}$ の交換子および反交換子を計算せよ．

1-16　シュテルン・ゲルラッハの実験での磁気モーメントは $\boldsymbol{\mu} = \mu\boldsymbol{\sigma}$ である．$\boldsymbol{\mu}^2$ の測定で得られる可能な結果についてどんなことが言えるか？ これと問題1-4を比較せよ．

1-17　次の関係

$$\sigma_x = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\pi}{4}\sigma_y}\,\sigma_z\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\pi}{4}\sigma_y}$$

を使って σ_x の固有ベクトルを σ_z の固有ベクトルで表せ．この σ_x の固有ベクトルの確率的解釈は何か？

1-18　$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{b}$ を行列で表せ．そして行列の積を使って $\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{a}\,\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{b}$ に対する行列を求めよ．そして σ についての積の関係式を確認せよ．

1-19　式(1.10.3)のパウリの行列は σ_z の固有ベクトルを基底としている．σ_x または σ_y の固有ベクトルを基底とするとこれらの行列はどのように書けるか？

1-20　シュテルン・ゲルラッハの観測は σ'_z の成分 $\psi(\sigma'_z = \pm 1)$ で書かれる単位ベクトル $|\ \rangle$ で記述される原子に対して行われる．σ_x, σ_y, σ_z の期待値(これを3次元ベクトルの期待値 $\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle$ と記す)を波動関数 $\psi(\sigma'_z)$ で書き表せ．ここで状態は規格化されている以外は任意とする．そして $\langle\boldsymbol{\sigma}\rangle$ は3次元の単位ベクトルであることを示せ．

1-21a　次の交換子の恒等式を示せ.

$$[X, YZ] = Y[X, Z] + [X, Y]Z .$$

類似の交換子 $[XY, Z]$ はどうなるか？「交換子 $[X, Y]$ は X と Y に関して線形である」ことは次の交換子

$$[X_1 + X_2, Y_1 + Y_2]$$

に対して何を示唆するか？

1-21b　次の恒等式を示せ.

$$\big[X, [Y, Z]\big] + \big[Y, [Z, X]\big] + \big[Z, [X, Y]\big] = 0 .$$

次のような形をとることによって，3次元ベクトルについてどのようなことが言えるか?

$$X = \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{x} , \qquad Y = \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{y} , \qquad Z = \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{z} .$$

それを示せ.

1-22a　次の観測記号のエルミート共役について述べよ.

$$X^\dagger X , \quad X^\dagger Y + Y^\dagger X , \quad \mathrm{i}\big(X^\dagger Y - Y^\dagger X\big) .$$

また固有ベクトルの方程式 $\langle a'\big|A = a'\langle a'\big|$ についてはどうか.

1-22b　X を非エルミートな演算子とする．$X^\dagger X$ および $XX^\dagger$ のエルミート性はどうか？ また次の式がエルミートであることを示せ.

$$A \equiv \tfrac{1}{2}\left(X + X^\dagger\right) , \qquad B \equiv \tfrac{1}{2\mathrm{i}}\left(X - X^\dagger\right) .$$

これより以下のように書くことができることがわかる.

$$X = A + \mathrm{i}B .$$

$X^\dagger X$ および $XX^\dagger$ に関する結果を適用して $(1/\mathrm{i})[A, B]$ のエルミート性について調べよ.

1-23　エルミート演算子 A は固有値 a' および固有ベクトル $\big|a'\rangle$ を持ち，エルミート演算子 B は任意であるとする．行列要素 $\langle a'\big|B\big|a''\rangle$ は次の和則を満たすことを示せ.

$$\sum_{a''}(a'' - a')\big|\langle a'\big|B\big|a''\rangle\big|^2 = \tfrac{1}{2}\langle a'\big|\big[B, [A, B]\big]\big|a'\rangle .$$

1-24　行列でのトレースの意味を使って次の式を示せ.

$$\mathrm{tr}\,\{XY\} = \mathrm{tr}\,\{YX\} .$$

$\mathrm{tr}\,\{[X,Y]\}$ はどうなるか？ また $\mathrm{tr}\,\{f(A)\}$ を数値 $f(a')$ を使って書け．

1-25a $|a'a'|$ より $|b'b'|$ を構成することを使って，次の式を示せ．

$$\sum_{b'}|b'b'| = \sum_{a'}|a'a'| \qquad [=1]\,.$$

1-25b b ベクトルを a ベクトルに変換することより次の式を示せ．

$$\sum_{b'}\langle b'|X|b'\rangle = \sum_{a'}\langle a'|X|a'\rangle \qquad [=\mathrm{tr}\,\{X\}]\,.$$

1-26 トレースは演算子の数値的な性質であり，ある特別な行列表示とは独立である．これを確認するために，a で表示された行列 $U^{-1}XU$ を b で表示すると X となるユニタリー行列 U が存在することを示せ．そして $\mathrm{tr}\left\{U^{-1}XU\right\} = \mathrm{tr}\,\{X\}$ （なぜ？）より，トレースはそれを計算するのに使われた行列の表示に依らないことを示せ．

1-27 次の式を示せ．

$$\mathrm{tr}\left\{X^\dagger X\right\} = \sum_{a',a''}\left|\langle a'|X|a''\rangle\right|^2 \geq 0 \qquad [=0 \text{ は } X=0 \text{ のときのみ}]$$

これは正規直交演算子の組 $|a'a''|$ に対応した表示で書かれた，演算子 X の長さの 2 乗である．次の不等式を示せ．

$$\mathrm{tr}\left\{X^\dagger X\right\}\mathrm{tr}\left\{Y^\dagger Y\right\} \geq \left|\mathrm{tr}\left\{X^\dagger Y\right\}\right|^2 .$$

等号はどんなときに成立するか？

1-28a 単位記号と 3 個のパウリの演算子を用いて，以下の 4 個のエルミート演算子を定義する．

$$\begin{aligned}
B_{00} &= \tfrac{1}{2}(1+\sigma_x+\sigma_y+\sigma_z)\,,\\
B_{10} &= \sigma_x B_{00}\sigma_x\,,\\
B_{01} &= \sigma_z B_{00}\sigma_z\,,\\
B_{11} &= \sigma_z\sigma_x B_{00}\sigma_x\sigma_z\,.
\end{aligned}$$

これらが実際エルミートであることを示し，B_{jk} $(j,k=0,1)$の固有値を求めよ．そして次の式を示せ．

$$\mathrm{tr}\,\{B_{jk}\} = 1 \qquad \text{および} \qquad \mathrm{tr}\,\{B_{jk}B_{j'k'}\} = 2\delta_{jj'}\delta_{kk'}\,.$$

1-28b　B_{jk} は完全系を成す，つまりパウリのベクトル演算子 $\boldsymbol{\sigma}$ の任意の関数 X は以下の形で書くことができる．

$$X = \sum_{j,k} x_{jk} B_{jk} \ .$$

まずこのことを示せ．次に係数を $x_{jk} = \mathrm{tr}\,\{(?)X\}$ の形で求めるとき(?)はどうなるかを見つけよ．与えられた X に対して係数 x_{jk} は一意的に決まるか？ 演算子 $1, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ を B_{jk} の和で書き表せ．

1-28c　演算子 X および Y はそれぞれ係数 x_{jk} および y_{jk} で特定される．$\mathrm{tr}\,\{X\}$, $\mathrm{tr}\left\{X^\dagger X\right\}$ および $\mathrm{tr}\left\{Y^\dagger X\right\}$ をこれらの係数で表せ．

1-29　次の式の値を求めよ．

$$\mathrm{tr}\left\{\frac{1+(\sigma_x+\sigma_y)/\sqrt{2}}{2}\,\frac{1+(-\sigma_x+\sigma_y)/\sqrt{2}}{2}\right\} \ .$$

この数値に対してどんな物理的な意味を持たせることができるか？

1-30a　期待値は線型である．

$$\big\langle(X+Y)\big\rangle = \langle X\rangle + \langle Y\rangle \ , \qquad \langle\lambda X\rangle = \lambda\,\langle X\rangle \ ,$$

そして物理量を表すエルミート演算子の期待値は実数である．

$$\langle A\rangle^* = \langle A\rangle \ , \ \langle B\rangle^* = \langle B\rangle \ , \ \ldots \ .$$

より一般的には次のように書ける．

$$\big\langle(A+\mathrm{i}B)\big\rangle^* = \big\langle(A-\mathrm{i}B)\big\rangle \ , \text{ すなわち } \langle X\rangle^* = \left\langle X^\dagger\right\rangle \ .$$

また $\langle 1\rangle = 1$ である．ここで**確率演算子** P (密度行列とも呼ばれる)を次のようにして定義する．

$$\Big\langle\big|a'a''\big|\Big\rangle = \langle a''|P|a'\rangle \ .$$

($\Big\langle\big|b'b''\big|\Big\rangle$ も同じ形となるか?)．このようにすると次の演算子

$$X = \sum_{a',a''} \langle a'|X|a''\rangle\,|a'a''|$$

の期待値は以下のように書ける．

$$\langle X\rangle = \sum_{a',a''} \langle a'|X|a''\rangle\langle a''|P|a'\rangle = \mathrm{tr}\,\{XP\} \ .$$

P はエルミートであり，$\mathrm{tr}\,\{P\} = 1$ であることを示せ．

1-30b　記号 $\left|a'a'\right|$ は負でない値 0 および 1 を持つ物理量を表し，次のようになる．

$$\left\langle\left|a'a'\right|\right\rangle = \left\langle a'\middle|P\middle|a'\right\rangle \geq 0 \,.$$

もしエルミート演算子 P がある物理的性質を表すと見なされると以下のように書けることを示せ．

$$P = \sum_{p'} p'\left|p'p'\right| \qquad \text{ただし} \quad p' \geq 0\,,\ \sum_{p'} p' = 1\,.$$

次の式

$$\langle X\rangle_P = \sum_{p'} p' \langle X\rangle_{p'}$$

は，よく知られた次の期待値に重みを掛けた平均値である．

$$\langle X\rangle_{p'} = \mathrm{tr}\left\{X\left|p'p'\right|\right\} = \left\langle p'\middle|X\middle|p'\right\rangle \,.$$

もし $P^2 = P$ ならばどうなるか？

1-31　物理的性質 B が観測され $B = b'$ である原子が選択された．これに対応する確率演算子 P は何か？ 非選択な B の観測だとどうなるか？

1-32　シュテルン・ゲルラッハの測定で，ある源から出てくる原子の $\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z$ の期待値を決めた．これらの原子を特徴付ける確率演算子は以下のようになることを示せ．

$$P = \frac{1}{2}\left(1 + \langle\boldsymbol{\sigma}\rangle\cdot\boldsymbol{\sigma}\right)\,.$$

これと問題 1-20 を比較せよ．

1-33a　演算子 X の行列式 $\det\{X\}$ は以下の微分形で定義できる．

$$\delta\log\det\{X\} = \mathrm{tr}\left\{X^{-1}\delta X\right\}\,.$$

ただし $\det\{1\} = 1$ とする．この定義式で一意的な $\det\{X\}$ を得るためには積分可能でなければならない．そのためには X の独立な無限小変化 $\delta_1 X$ および $\delta_2 X$ に対して次の式が成立することを示せ．

$$\delta_1\delta_2\log\det\{X\} = \delta_2\delta_1\log\det\{X\}\,.$$

演算子 X の逆演算子の変分 δX^{-1} の形を使って示せばよい．

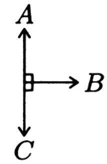
1-33b　変分 $\delta(XY)$ を変分 δX と δY で表すとどうなるか？ これを使って次の式を示せ．

$$\det\{XY\} = \det\{X\}\det\{Y\}\,.$$

λ を定数とすると，$\det\{\lambda X\}$ と $\det\{X\}$ の関係はどうなるか？

1-34　1.5 節において次の確率が強め合うまたは打ち消し合う干渉を示すことを予想した．

$$p(\overset{a}{+},\overset{b}{1},\overset{c}{-}) \qquad \text{および} \qquad p(\overset{a}{+},\overset{b}{1},\overset{c}{+})$$



また 1.12 節ではそのために必要な確率振幅を具体的に求めた．これを使って干渉を確かめよ．簡単のため 3 方向を方位角 $\varphi = 0$ とした x, z 平面上にとって示せ．

1-35　U と V はユニタリー演算子である．UV および VU もユニタリーであることを示せ．

1-36a　2×2 の観測代数のすべての演算子は 1 と 3 個の σ の線形結合で書ける．u_0 を実定数として次の式について考える．

$$U = u_0 + \mathrm{i}\boldsymbol{u} \cdot \boldsymbol{\sigma} .$$

演算子 U がユニタリーであるための，u_0 と数ベクトル $\boldsymbol{u}$ に対する条件は何か？

1-36b　ユニタリー演算子 U と V がそれぞれ定数 $u_0, \boldsymbol{u}$ および $v_0, \boldsymbol{v}$ で与えられている．これより UV および VU を前問の形で表したときの定数を求めよ．そしてユニタリー演算子となっていることを確かめよ．

1-36c　U が i とエルミート演算子の積の指数関数の形で書かれるとして，$u_0, \boldsymbol{u}$ に対するユニタリー条件を満たすように形を決めよ．

1-36d　どのように $u_0, \boldsymbol{u}$ を簡単に修正することで，u_0 が実数であるという制約を除くことができるか？

1-37　定数 λ がどのような条件を満たすときに次の式はユニタリー演算子になるか？

$$\frac{1 + \mathrm{i}\lambda\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n}}{1 - \mathrm{i}\lambda\boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{n}} \qquad (\text{ここで } \boldsymbol{n}^* = \boldsymbol{n},\ \boldsymbol{n} \cdot \boldsymbol{n} = 1)$$

問題 1-36a の形および問題 1-36c の形で議論せよ．

1-38　演算子 $\mathrm{e}^{\frac{\pi\mathrm{i}}{2}\sigma_x}\,\mathrm{e}^{\frac{\pi\mathrm{i}}{2}\sigma_y}\,\mathrm{e}^{\frac{\pi\mathrm{i}}{2}\sigma_z}$ を計算せよ．

1-39　ユニタリー演算子 U の固有ベクトルの間のエルミート共役の関係式

$$\langle u'|^\dagger = |u'\rangle$$

は，次の固有ベクトル方程式と矛盾しないことを示せ．

$$\langle u'|U = u'\langle u'| \ .$$

1-40　演算子 U はベクトル $|a_k\rangle$ を巡回させる演算子である(式(1.14.3)を参照)．固有ベクトル

$$|u_l\rangle = \sum_k |a_k\rangle\langle a_k|u_l\rangle$$

を，固有値方程式を解いて求めよ．つまり固有値 u_l および規格化まで考慮した係数 $\langle a_k|u_l\rangle$ を決めよ．

1-41　関係式

$$U^l|a_k\rangle = |a_{k+l}\rangle$$

を使って，次の式を示せ．

$$U^l = \sum_{m,n} |a_m\rangle\delta_{m-n,l}\langle a_n| \ .$$

この方法で式(1.14.14)を示せ．

1-42　エルミートではない演算子 A と，そのエルミート共役な演算子が交換するとする(この性質を持つ演算子は**正規演算子**と呼ばれる)．

$$AA^\dagger = A^\dagger A \ .$$

演算子 A はエルミート演算子 B の(複素)関数で与えられることを示せ．

$$A = f(B) = f_1(B) + \mathrm{i}f_2(B) \ , \qquad A^\dagger = f^*(B) = f_1(B) - \mathrm{i}f_2(B) \ .$$

ここで $f_{1,2}$ は実関数である．式(1.14.15)との関連について述べよ．

1-43a　ユニタリー演算子 U と V は1.14節のように相補的に定義されている．$U \to V$, $V \to U^{-1}$ の置き換えに対して，U と V の代数的な性質は不変であることを確かめよ．そして固有ベクトルの置換によって U と V の相補的な定義がどうなるかを調べよ．

1-43b　ユニタリー演算子 W は定義より次の性質を持つ．

$$W|v_k\rangle = |u_k\rangle \qquad ここで \quad k = 1, 2, \ldots, n \ .$$

次の式を示せ．

$$W|u_k\rangle = |v_{n-k}\rangle \ .$$

そして次の関係を示せ.

$$W^{-1}UW = V\,, \qquad W^{-1}VW = U^{-1}\,.$$

1-43c　次の式

$$W = \sum_{k=1}^{n} \big|u_k v_k\big| = \sum_{k=1}^{n} \big|u_k u_k\big| \frac{1}{\langle u_k | v_k \rangle} \big|v_k v_k\big|$$

より出発して，次の式の係数 w_{kl} を求めよ.

$$W = \sum_{k,l=1}^{n} w_{kl} U^k V^l\,.$$

1-44　U と V の代数的性質より式(1.14.32)の uv 変換の関数が矛盾しないことを，次の行列要素を求め比較することで示せ.

$$\langle u_k | UV | v_l \rangle\,, \quad \langle u_k | VU | v_l \rangle\,.$$

1-45　次の式(式(1.14.10)を参照)を思い出そう.

$$u^n - 1 = \prod_{u'} (u - u')\,.$$

ただし $u' = u_k = \mathrm{e}^{(2\pi \mathrm{i}/n)k} \quad (k = 1, \ldots, n)$である．この式の対数をとり $1/u$ のベキで展開することで次式を示せ.

$$\sum_{u'} (u')^r = 0 \qquad \text{ただし}\ 0 < r < n\,.$$

1-46　次のトレースに対する巡回的な性質

$$\mathrm{tr}\,\{XYZ\} = \mathrm{tr}\,\{YZX\} = \mathrm{tr}\,\{ZXY\}$$

を使って，次の式(1.14.54)の別の証明を行え.

$$\mathrm{tr}\,\{U^k V^l\} = 0 \qquad \text{ただし}\quad 0 < k < n \quad \text{または} \quad 0 < l < n\,.$$

1-47　次の式

$$p(u', v') = \mathrm{tr}\,\{\big|u'u'\big|\big|v'v'\big|\}$$

を，以下の形

$$\big|u'u'\big| = \frac{1}{n} \sum_{l} (U/u')^l$$

および $\left|v'v'\right|$ に対する同様の形を用いて計算せよ．

1-48　問題 1-45 の結果を適用して，観測記号 $\left|u'u'\right|$ の完全性

$$\sum_{u'}\left|u'u'\right| = 1$$

を証明せよ．

1-49a　次の式について考察する．

$$F = f(U,V) = \sum_{k,l} f_{kl}U^kV^l = \sum_{k,l}\overline{f}_{kl}V^lU^k \ .$$

係数 $\overline{f}_{kl}$ を f_{kl} で表せ．

1-49b　F が U と交換する，つまり $U^{-1}FU = F$ であるならば，U のみの関数であることを示せ．同様に F が V と交換するならば V のみの関数であることを示せ．これより F が U および V と交換するならば，単位記号 1 の定数倍とならなければならないことを示せ．

1-50　演算子空間でベクトルと見なした n^2 個の次の観測記号は正規直交系を成すことを示せ．

$$\mathrm{tr}\left\{\left|a'a''\right|^\dagger\left|a'''a^{\mathrm{iv}}\right|\right\} = \delta(a',a''')\,\delta(a'',a^{\mathrm{iv}})\ .$$

そして n^2 乗の U と V の多項式も同様の性質を持つことを示せ．

$$\frac{1}{n}\mathrm{tr}\left\{\left(U^kV^l\right)^\dagger U^{k'}V^{l'}\right\} = \delta_{kk'}\delta_{ll'}\ .$$

1-51　次の式

$$\sum_{a',a''}\left|a'a''\right|^\dagger X\left|a'a''\right| = 1\,\mathrm{tr}\{X\}$$

を示し，次の類似の関係式を，問題 1-49b を適用するかまたは $X = U^rV^s$ とおいて示せ．

$$\frac{1}{n}\sum_{k,l}\left(U^kV^l\right)^\dagger X\,U^kV^l = 1\,\mathrm{tr}\{X\}$$

1-52　問題 1-51 の両方の関係式から $n = 2$ に対して次の式を示せ．

$$\frac{1}{2}\left(X + \boldsymbol{\sigma}\cdot X\boldsymbol{\sigma}\right) = 1\,\mathrm{tr}\{X\}\ .$$

$X = 1, \sigma_k$ に対して成り立つことを確認せよ．

1-53　次式を使って $\langle q'|p'\rangle$ を定数倍を除いて求めよ.

$$\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial q'}\langle q'| = \langle q'|p\ , \qquad \frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial p'}|p'\rangle = q|p'\rangle\ .$$

1-54　関係式

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'q}\, p\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}p'q} = p - p'$$

を，次のような形に直せ.

$$\left[p,\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}p'q}\right] = \frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial q}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p'q}\ .$$

q 表示のシュレーディンガーの記述を使って以下の一般化を示せ.

$$\left[p, f(q)\right] = \frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\mathrm{d}f(q)}{\mathrm{d}q}\ .$$

q と p を交換した類似の関係式を書け.

1-55　次の式

$$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}f(q)}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}q'p}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}f(q)}$$

を異なる方法で整理して，以下の関係式を示せ.

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{\mathrm{i}q'[p+f'(q)]} &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}q'p}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}[f(q)-f(q-q')]}\\ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}[f(q+q')-f(q)]}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}q'p}\ .\end{aligned}$$

ただし

$$f'(q) = \frac{\mathrm{d}f(q)}{\mathrm{d}q} = \mathrm{i}\left[p, f(q)\right]\ .$$

この式を $f'(q) = -(p'/q')q$ に適用してよく知られた関係式を求めよ．同様に $f'(q) = \kappa q^2/2$ に適用し新しい関係式を求めよ.

1-56　問題 1-54 の結果を一般化して次の式を示せ.

$$\frac{\partial}{\partial q}f(q,p) = \mathrm{i}\left[p, f(q,p)\right]\ , \qquad \frac{\partial}{\partial p}f(q,p) = \mathrm{i}\left[f(q,p), q\right]\ .$$

そして微分の順序は交換できることを示せ.

$$\frac{\partial}{\partial p}\frac{\partial}{\partial q}f(q,p) = \frac{\partial}{\partial q}\frac{\partial}{\partial p}f(q,p)\ .$$

第2章

連続的 q, p 自由度

2.1　波動関数

U または V ベクトルの完全性は，たとえば

$$1 = \sum_k \big|u_k\big\rangle\big\langle u_k\big| \tag{2.1.1}$$

と和で表すことができる．しかし，$q_k = k\epsilon$ とおいて極限 $\epsilon \to 0$ をとることにより $q'(= q_k)$ を連続変数にすると，和を積分に置き換えなければならない．そのために，まず

$$\big\langle u_k\big| = \sqrt{\epsilon}\big\langle q'\big| , \quad \big|u_k\big\rangle = \big|q'\big\rangle\sqrt{\epsilon} \tag{2.1.2}$$

とおくと，完全性は

$$1 = \sum \big|q'\big\rangle\epsilon\big\langle q'\big| , \qquad \text{ただし}\quad \epsilon = q_{k+1} - q_k = \Delta q' \tag{2.1.3}$$

となり，極限 $\epsilon \to 0$ をとると

$$1 = \int_{-\infty}^{\infty} \big|q'\big\rangle\,\mathrm{d}q'\,\big\langle q'\big| \tag{2.1.4}$$

と積分で表される．この式は q ベクトルの完全性を表している．この記号的な表現を波動関数で表せば

$$\big\langle 1\big|2\big\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{\big\langle 1\big|q'\big\rangle}_{=\psi_1(q')^*}\ \mathrm{d}q'\ \underbrace{\big\langle q'\big|2\big\rangle}_{=\psi_2(q')} \tag{2.1.5}$$

となり，特に規格化されたベクトルに対しては次の式を得る．

$$\begin{aligned}\big\langle\ \big|\ \big\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(q')^*\,\mathrm{d}q'\,\psi(q') &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q'\,\big|\psi(q')\big|^2 \\ &= 1\,.\end{aligned} \tag{2.1.6}$$

ベクトル $|\ \rangle$ もしくは波動関数 $\psi(q')$ で表される系に対して q の測定を実行したとき，その値が q' の周り $\mathrm{d}q'$ の範囲に入る確率 $\mathrm{d}P$ が

$$\left|\langle u_k|\ \rangle\right|^2 = \epsilon\left|\langle q'|\ \rangle\right|^2 \to \mathrm{d}q'\left|\psi(q')\right|^2 \tag{2.1.7}$$

で与えられるという確率解釈からも，同じ結果を得る(シュレーディンガー波動関数のこの確率解釈はボルンに依っている)．観測結果の全確率は 1 でなければならないので

$$\int \mathrm{d}P = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q'\,\left|\psi(q')\right|^2 = 1 \tag{2.1.8}$$

が成り立つからである．この積分が存在するためには，$|q'| \to \infty$ のときに $\psi(q') \to 0$ となることが必要である．現実の物理系では q' が本当に無限大になることはない．

qp 変換関数を得るには uv 変換関数(1.14.32)のラベルを付け換えて

$$\langle u_k|v_l\rangle = \sqrt{\epsilon}\langle q'|p'\rangle\sqrt{\epsilon} = \frac{1}{\sqrt{2\pi/\epsilon^2}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k\epsilon)(l\epsilon)} \tag{2.1.9}$$

と表せばよく，

$$\langle q'|p'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}q'p'} \tag{2.1.10}$$

となる．$\langle u_k|u_l\rangle = \delta_{kl}$ についてはどのようになるだろうか？ この両辺を $\epsilon = \sqrt{\epsilon}\sqrt{\epsilon}$ で割って

$$\langle q'|q''\rangle = \frac{\delta(q', q'')}{\epsilon} \to \delta(q' - q'') \tag{2.1.11}$$

を得る．ここでディラックのデルタ関数を $\epsilon \to 0$ の極限をとり

$$\begin{aligned} q' \neq q''\ ,\ q' - q'' \neq 0: &\qquad \delta(q' - q'') = 0\ , \\ q' = q''\ ,\ q' - q'' = 0: &\qquad \delta(q' - q'') = \infty \end{aligned} \tag{2.1.12}$$

として導入した．任意の関数 $\psi(u_k)$ に対して次の置き換え

$$\begin{aligned} &\sum_l \underbrace{\langle u_k|u_l\rangle}_{\to\,\epsilon\delta(q'-q'')} \psi(u_l) = \psi(u_k)\ , \\ &\longrightarrow\quad \int_{-\infty}^{\infty} \delta(q' - q'')\,\mathrm{d}q''\,\psi(q'') = \psi(q') \end{aligned} \tag{2.1.13}$$

が成り立つことから，デルタ関数のもう 1 つの性質が以下のように導かれる．すなわち，もし $q'' \neq q'$ ならば $\delta(q' - q'') = 0$ であるから $q'' = q'$ での値 $\psi(q'')$ のみが積分に現れ，それゆえ次の式が成り立つ．

$$\int_{-\infty}^{\infty} \delta(q' - q'')\,\mathrm{d}q'' = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q'\,\delta(q' - q'') = 1\ . \tag{2.1.14}$$

これらすべての間で整合性がとれているかどうかを調べると，対応関係

$$\sum_l \underbrace{\langle u_k|v_l\rangle\langle v_l|u_m\rangle}_{\to(\sqrt{\epsilon}\langle q'|p'\rangle\sqrt{\epsilon})(\sqrt{\epsilon}\langle p'|q''\rangle\sqrt{\epsilon})} = \langle u_k|u_m\rangle = \delta_{km} \to \epsilon\delta(q'-q''),$$

$$\longrightarrow \quad \int_{-\infty}^{\infty}\langle q'|p'\rangle\,\mathrm{d}p'\,\langle p'|q''\rangle = \delta(q'-q'') \tag{2.1.15}$$

が成立しなければならないが，これは等式

$$\int|p'\rangle\mathrm{d}p'\langle p'| = 1 \quad \text{および} \quad \langle q'|q''\rangle = \delta(q'-q'') \tag{2.1.16}$$

を組み合わせて形式的に正しいことがわかる．ここで最初の式は p ベクトルの完全性であり，第 2 式は q ベクトルの正規直交性を表している．波動関数に対してはどのようになるであろうか？ まず

$$\langle q'|p'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}q'p'}, \quad \langle p'|q''\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p'q''} \tag{2.1.17}$$

であるから，

$$\delta(q'-q'') = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p'}{2\pi}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'(q'-q'')} \tag{2.1.18}$$

が成り立たなければならない．しかし，この積分は積分範囲が $-\infty$ から ∞ であるから収束しない！ 実際，この積分は

$$\begin{aligned}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p'}{2\pi}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'(q'-q'')} &= \int_0^{\infty}\frac{\mathrm{d}p'}{\pi}\cos\bigl(p'(q'-q'')\bigr)\\ &= \int_0^{\infty}\frac{\mathrm{d}p'}{\pi}\frac{\partial}{\partial p'}\frac{\sin\bigl(p'(q'-q'')\bigr)}{q'-q''}\\ &= \lim_{P\to\infty}\frac{1}{\pi}\frac{\sin\bigl(P(q'-q'')\bigr)}{q'-q''} = ?\end{aligned} \tag{2.1.19}$$

と不定になってしまう．一見してわかるように，この困難さは $P=\infty$ が許されないという制限をまだ明確に取り入れていない事実に由来する．

この困難が単に見かけだけの問題であることを理解するために，個々の $\langle q'|p'\rangle$ や $\langle p'|q'\rangle$ などの変換関数を用いてこれまで何を行ってきたかを再録すると，

$$\begin{aligned}\langle q'|\ \rangle &= \int\langle q'|p'\rangle\mathrm{d}p'\langle p'|\ \rangle,\\ \langle p'|\ \rangle &= \int\langle p'|q'\rangle\mathrm{d}q'\langle q'|\ \rangle\end{aligned} \tag{2.1.20}$$

すなわち

$$\begin{aligned}\psi(q') &= \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{\mathrm{i}q'p'}\frac{\mathrm{d}p'}{\sqrt{2\pi}}\psi(p'),\\ \psi(p') &= \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p'q'}\frac{\mathrm{d}q'}{\sqrt{2\pi}}\psi(q')\end{aligned} \tag{2.1.21}$$

が成り立つことであった．ここで，たとえばまず $\psi(p')$ を消去すると

$$\psi(q') = \int_{-\infty}^{\infty} e^{iq'p'} \frac{dp'}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ip'q''} dq'' \psi(q'') \tag{2.1.22}$$

となり，これはフーリエ*積分定理そのものである．すなわち「任意」の関数 $\psi(q')$ は，関数 $e^{iq'p'}$ $(-\infty < p' < \infty)$ に上式中に与えた係数を掛けて作られる線形結合として表すことができるという定理である．一方，積分の順番を変えて最初に p' で積分すると $\delta(q' - q'')$ の積分に帰着する．しかし，このまま積分を実行するとどのようになるだろうか？

例として，規格化された波動関数

$$\psi(q') = \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{1}{2}q'^2} \tag{2.1.23}$$

を考える．この規格化は基本的なガウス†積分

$$\int_{-\infty}^{\infty} dq'\, e^{-q'^2} = \sqrt{\pi} \tag{2.1.24}$$

の結果である．この波動関数のフーリエ変換は

$$\begin{aligned}
\psi(p') &= \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ip'q'} \frac{dq'}{\sqrt{2\pi}} \psi(q') \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\pi^{1/4}} \int_{-\infty}^{\infty} e^{-ip'q'} dq'\, e^{-\frac{1}{2}q'^2} \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \frac{1}{\pi^{1/4}} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} dq'\, e^{-\frac{1}{2}(q' + ip')^2}}_{=\sqrt{2\pi}} e^{-\frac{1}{2}p'^2} \\
&= \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{1}{2}p'^2}
\end{aligned} \tag{2.1.25}$$

となり，これも明らかに規格化されている．さらに積分を行うと

$$\begin{aligned}
\psi(q') &= \frac{1}{\pi^{1/4}} \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{\infty} \underbrace{e^{iq'p'} dp'\, e^{-\frac{1}{2}p'^2}}_{=dp'\, e^{-\frac{1}{2}(p' - iq')^2}\, e^{-\frac{1}{2}q'^2}} \\
&= \frac{1}{\pi^{1/4}} e^{-\frac{1}{2}q'^2}
\end{aligned} \tag{2.1.26}$$

となり，何らの困難もなく出発点に戻ることができた（ガウス型フーリエ積分については，特に 5.4 節と 6.5 節でさらに議論する）．

物理的な $\psi(q')$ に対して，p' が実際に動く範囲は有限であるから，式(2.1.19)で P を大きいがしかし有限の値であるとして，まったく問題を生じないことは明らかである．したがって，このことを確かめるために，等式

---

*Jean Baptiste Joseph FOURIER (1768–1830)　†Karl Friedrich GAUSS (1777–1855)

$$\psi(q') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\pi} \frac{\sin\bigl(P(q'-q'')\bigr)}{q'-q''}\, \mathrm{d}q''\, \psi(q'') \tag{2.1.27}$$

を調べてみよう．変数変換 $q'' = q' + \chi/P$, $\mathrm{d}q'' = \mathrm{d}\chi/P$ を行うと

$$\psi(q') \stackrel{?}{=} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\chi}{\pi} \frac{\sin\chi}{\chi}\, \psi(q' + \chi/P) \tag{2.1.28}$$

となる．ここでは以下のような議論で満足することにしよう．すなわち，大きな χ に対しては $\sin\chi$ が激しく振動して積分への寄与が打ち消し合い，実効的に χ の値は $|\chi| \sim 1$ に制限される．さらに連続性の要請により，十分大きな P では $\psi\,(q'+\sim 1/P) \to \psi(q')$ と置き換えることが許される．したがって，

$$\psi(q') = \psi(q') \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\chi}{\pi} \frac{\sin\chi}{\chi}}_{=1} = \psi(q') \tag{2.1.29}$$

となり，期待された結果を得る．

さらに一般的には，p' は大きくはなり得るがしかし有限の値に留まるという制限について，以下のようにもっと厳密に定義できる．すなわちデルタ関数を極限の形で

$$\delta(q'-q'') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}p'}{2\pi} K(\epsilon p')\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}p'(q'-q'')} \Big|_{\epsilon \to 0} \tag{2.1.30}$$

と表す．ここで関数 $K(\epsilon p')$ は条件

$$\begin{aligned} &K(\epsilon p') \to 0 \qquad (|p'| \to \infty \text{ と一定の } \epsilon \text{ ，すなわち } |\epsilon p'| \to \infty)\,, \\ &K(\epsilon p') \to 1 \qquad (\epsilon \to 0 \text{ と一定の } p' \text{ ，すなわち } \epsilon p' \to 0) \end{aligned} \tag{2.1.31}$$

を満たし，すべての積分計算を実行した後に極限操作 $\epsilon \to 0$ を行うとする．これまで議論してきた例は

$$K(\epsilon p') = \left\{ \begin{array}{ll} 0 & (\epsilon|p'| > 1) \\ 1 & (\epsilon|p'| < 1) \end{array} \right\} \qquad \text{ただし } \epsilon = 1/P \tag{2.1.32}$$

と選んだことに対応している．もう 1 つの例として

$$K(\epsilon p') = \mathrm{e}^{-\epsilon|p'|} \tag{2.1.33}$$

を用いると（$\epsilon > 0$ として，最後に極限 $\epsilon \to 0$ をとると了解して）デルタ関数は

$$\begin{aligned} \delta(q'-q'') &= \int_0^{\infty} \frac{\mathrm{d}p'}{2\pi}\, \mathrm{e}^{-\epsilon p'} \left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'(q'-q'')} + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}p'(q'-q'')} \right] \\ &= \mathrm{Re}\frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} \mathrm{d}p'\, \mathrm{e}^{-[\epsilon - \mathrm{i}(q'-q'')]p'} \\ &= \mathrm{Re}\frac{1}{\pi} \frac{1}{\epsilon - \mathrm{i}(q'-q'')} \\ &= \frac{1}{\pi} \frac{\epsilon}{(q'-q'')^2 + \epsilon^2} \end{aligned} \tag{2.1.34}$$

と表される．確かにその値は

$$\left\{ \begin{array}{l} q' - q'' \neq 0:\ \delta(q' - q'') \to 0 \\ q' - q'' = 0:\ \delta(q' - q'') \to \infty \end{array} \right\} \qquad (\epsilon \to 0) \tag{2.1.35}$$

であり，さらに $q' - q'' = \epsilon x$ および $x = \tan\vartheta$ と置き換えて積分すると

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q'\, \delta(q' - q'') &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q' \frac{1}{\pi} \frac{\epsilon}{(q' - q'')^2 + \epsilon^2} = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x \frac{1}{x^2 + 1} \\ &= \frac{1}{\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \mathrm{d}\vartheta = 1 \end{aligned} \tag{2.1.36}$$

となることがわかる．

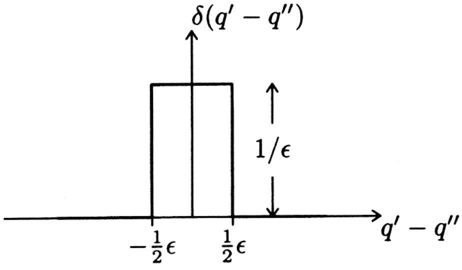
さらに別の例としては

$$K(\epsilon p') = \frac{\sin(\frac{1}{2}\epsilon p')}{\frac{1}{2}\epsilon p'} \to \left\{ \begin{array}{ll} 0 & (|\epsilon p'| \to \infty)\,, \\ 1 & (\epsilon p' \to 0) \end{array} \right. \tag{2.1.37}$$

が知られている．この場合には

$$\begin{aligned} \delta(q' - q'') &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}p'}{2\pi} \frac{\sin(\frac{1}{2}\epsilon p')}{\frac{1}{2}\epsilon p'}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}p'(q' - q'')} \\ &= \int_{0}^{\infty} \frac{\mathrm{d}p'}{\pi} \frac{\sin(\frac{1}{2}\epsilon p')}{\frac{1}{2}\epsilon p'} \cos\bigl(p'(q' - q'')\bigr) \\ &= \int_{0}^{\infty} \frac{\mathrm{d}p'}{\pi} \frac{1}{\epsilon p'} \left[\sin\bigl(p'(q' - q'' + \tfrac{1}{2}\epsilon)\bigr) - \sin\bigl(p'(q' - q'' - \tfrac{1}{2}\epsilon)\bigr)\right] \\ &= \frac{1}{2\epsilon} \left[\left\{ \begin{array}{ll} 1 & (q' - q'' > -\frac{1}{2}\epsilon) \\ -1 & (q' - q'' < -\frac{1}{2}\epsilon) \end{array} \right\} - \left\{ \begin{array}{ll} 1 & (q' - q'' > \frac{1}{2}\epsilon) \\ -1 & (q' - q'' < \frac{1}{2}\epsilon) \end{array} \right\} \right] \\ &= \frac{1}{\epsilon} \left\{ \begin{array}{ll} 0 & (q' - q'' > \frac{1}{2}\epsilon)\,, \\ 1 & (-\frac{1}{2}\epsilon < q' - q'' < \frac{1}{2}\epsilon)\,, \\ 0 & (q' - q'' < -\frac{1}{2}\epsilon) \end{array} \right. \end{aligned} \tag{2.1.38}$$

となり，この関数は以下のように図示できる．



この関数は $\epsilon \to 0$ では，デルタ関数に対するすべての条件を満たしていることは明らかである．この章の最初に，デルタ関数を $q' - q'' = 0$ では $1/\epsilon$ であり，$|q' - q''| = \epsilon, 2\epsilon, \ldots$ ではゼロとなる離散的な関数 $(1/\epsilon)\delta(q', q'')$ として導入したが，これまでに行ったことはその連続的な表現を与えることであった．

ここで以下のことに注目しよう．まず

$$\begin{aligned} \langle q'|q''\rangle &= \delta(q' - q'') \,, \\ q' \neq q'' \ : \quad \langle q'|q''\rangle &= 0 \end{aligned} \tag{2.1.39}$$

は q の固有状態の直交性を表している．しかし

$$q' = q'' \ : \quad \langle q'|q'\rangle = \infty \tag{2.1.40}$$

となり規格化の条件が失われた．このことは，q' の厳密な値というものは単純化しすぎていることを示している．q のように連続スペクトルを持つ量の測定では，非常に小さくはできるが決してゼロにはできないある範囲内でしか，その値を特定できないのである．このような状態の最も簡単な例は

$$|q', \Delta q'\rangle = \int_{q' - \frac{1}{2}\Delta q'}^{q' + \frac{1}{2}\Delta q'} \mathrm{d}q'' \frac{1}{\sqrt{\Delta q'}} |q''\rangle \tag{2.1.41}$$

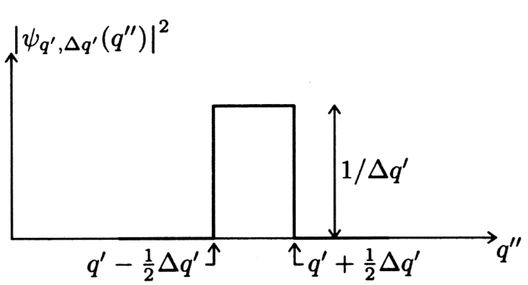
であり，波動関数で表すと

$$\psi_{q', \Delta q'}(q'') = \frac{1}{\sqrt{\Delta q'}} \begin{cases} 1 & (|q'' - q'| < \frac{1}{2}\Delta q') \,, \\ 0 & (|q'' - q'| > \frac{1}{2}\Delta q') \end{cases} \tag{2.1.42}$$

で与えられる．この波動関数は

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q'' |\psi_{q', \Delta q'}(q'')|^2 = 1 \tag{2.1.43}$$

と規格化され，被積分関数は下図で表される．



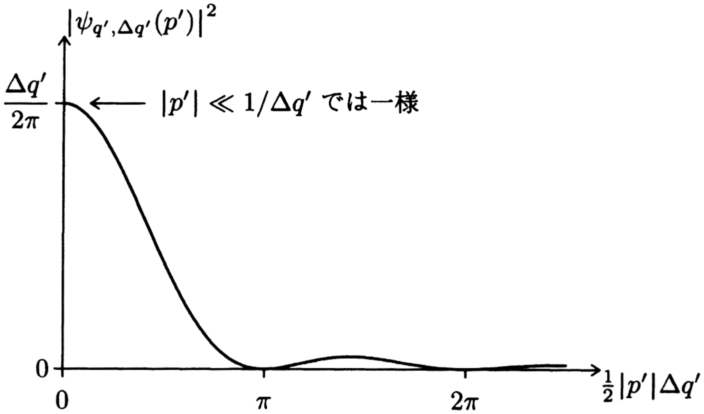
この状態の p 表示はどのようなものだろうか？ それを計算すると（もちろん，これは本質的に式(2.1.38)での逆フーリエ変換である）

$$\begin{aligned}\psi_{q',\Delta q'}(p') &= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q'' \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}p'q''}\, \psi_{q',\Delta q'}(q'') \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta q'}} \int_{q'-\frac{1}{2}\Delta q'}^{q'+\frac{1}{2}\Delta q'} \mathrm{d}q''\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}p'q''} \\ &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta q'}}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}p'q'} \frac{\sin(\frac{1}{2}p'\Delta q')}{\frac{1}{2}p'} \end{aligned} \tag{2.1.44}$$

となり，したがって確率分布は

$$\left|\psi_{q',\Delta q'}(p')\right|^2 = \frac{\Delta q'}{2\pi} \left[\frac{\sin(\frac{1}{2}p'\Delta q')}{\frac{1}{2}p'\Delta q'}\right]^2 \tag{2.1.45}$$

であり，下図のように表される．



全確率は($x = \frac{1}{2}p'\Delta q'$ を代入して積分すると)

$$\int_{\infty}^{\infty} \mathrm{d}p' \left|\psi_{q',\Delta q'}(p')\right|^2 = \frac{2}{\pi} \int_0^{\infty} \underbrace{\frac{1}{2}\Delta q' \mathrm{d}p' \left[\frac{\sin(\frac{1}{2}p'\Delta q')}{\frac{1}{2}p'\Delta q'}\right]^2}_{= \mathrm{d}x\,[(\sin x)/x]^2} = 1 \tag{2.1.46}$$

となり確かに規格化されている．

q のスペクトル – すなわち固有値の全体像–はゼロでない範囲が鋭く制限されているが，一方，p のスペクトルは非常に広がっている．実際，$|p'| \gg 1/\Delta q'$ の値に対して確率密度は(実効的に $\sin^2 \to \frac{1}{2}$ とする)

$$\left|\psi_{q',\Delta q'}(p')\right|^2 \sim \frac{1}{\pi\Delta q'} \frac{1}{p'^2} \tag{2.1.47}$$

の値の周りで振動している．全確率が存在する(そして 1 に等しい)ために十分なだけ $|p'| \to \infty$ ではゼロへと減少するが，しかし p'^2 の平均は存在せずに

$$\left\langle p'^2 \right\rangle_{q',\Delta q'} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}p'\, p'^2 \left|\psi_{q',\Delta q'}(p')\right|^2 = \infty \tag{2.1.48}$$

となる．この非物理的な振る舞いは，q のスペクトルが鋭く制限されているという不自然な性質を反映している．そこで次に，q と p の両方のスペクトルが実質的に有限の範囲に制限されている物理的な状態に関心を向けることにする．

2.2 期待値とその広がり

この目的のために，物理的状態 $|\ \rangle$ での q と p の期待値すなわち平均値

$$\langle q\rangle = \langle\ |q|\ \rangle, \quad \langle p\rangle = \langle\ |p|\ \rangle \tag{2.2.1}$$

およびこれらの平均値からの平均 2 乗偏差

$$\begin{aligned}(\delta q)^2 &= \langle\ |(q-\langle q\rangle)^2|\ \rangle \equiv \langle 1|1\rangle\,,\\ (\delta p)^2 &= \langle\ |(p-\langle p\rangle)^2|\ \rangle \equiv \langle 2|2\rangle\end{aligned} \tag{2.2.2}$$

を調べることにする．ただしここで

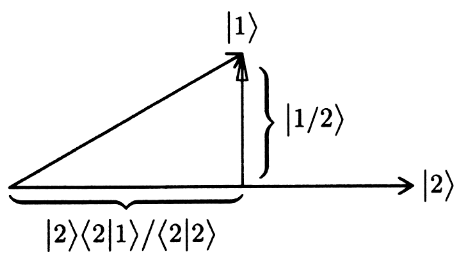
$$\langle 1| = \langle\ |(q-\langle q\rangle)\,, \qquad |2\rangle = (p-\langle p\rangle)|\ \rangle \tag{2.2.3}$$

とおいた．これから平均 2 乗偏差の積で表される量，およびこの量が満たす不等式

$$(\delta q)^2(\delta p)^2 = \langle 1|1\rangle\langle 2|2\rangle \geq |\langle 1|2\rangle|^2 \tag{2.2.4}$$

を考えることにしよう．この不等式は 3 次元ユークリッド空間での不等式 $\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{a}\,\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{b} \geq (\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{b})^2$，すなわち，$\cos^2\theta \leq 1$ に対応する．この不等式を証明するためにベクトル

$$|1/2\rangle = |1\rangle - |2\rangle\frac{\langle 2|1\rangle}{\langle 2|2\rangle} \tag{2.2.5}$$



を導入すると，

$$\langle 2|1/2\rangle = \langle 2|1\rangle - \langle 2|2\rangle\frac{\langle 2|1\rangle}{\langle 2|2\rangle} = 0 \tag{2.2.6}$$

となり，$|2\rangle$ と直交する．明らかに $\langle 1/2|1/2\rangle \geq 0$ が成り立ち，さらに等号が成り立つ場合は $|1/2\rangle = 0$ すなわち $|2\rangle$ が $|1\rangle$ の定数倍であるとき，言い換えるとこれらが平行である場合のみである．ここで式(2.2.6)を用いると

$$\langle 1/2|1/2\rangle = \langle 1|1/2\rangle = \langle 1|1\rangle - \frac{|\langle 1|2\rangle|^2}{\langle 2|2\rangle} \geq 0 \tag{2.2.7}$$

を得るが，これは(2.2.4)での不等式である．したがって次の不等式

$$(\delta q)^2(\delta p)^2 \geq \left|\langle\ |(q-\langle q\rangle)(p-\langle p\rangle)|\ \rangle\right|^2 \tag{2.2.8}$$

が証明された．ここで等号は $(p-\langle p\rangle)|\ \rangle$ と $(q-\langle q\rangle)|\ \rangle$ が平行すなわち

$$(p-\langle p\rangle)|\ \rangle = \lambda(q-\langle q\rangle)|\ \rangle \tag{2.2.9}$$

である場合にのみ成り立つ．ところで，エルミート演算子 A と B の積は恒等式(1.2.25)を用いて

$$AB = \tfrac{1}{2}\{A,B\} + \tfrac{\mathrm{i}}{2}\tfrac{1}{\mathrm{i}}[A,B] \tag{2.2.10}$$

となるから，2つのエルミート演算子 $\{A,B\}$ と $\frac{1}{\mathrm{i}}[A,B]$ の非エルミート的な線形結合で表される．エルミート演算子の対角行列要素– 期待値 – は実数である．そこで，$A=q-\langle q\rangle$ および $B=p-\langle p\rangle$ とすると，式(2.2.8)での絶対値の2乗は実部と虚部の2乗の和であるから

$$(\delta q\,\delta p)^2 \geq \underbrace{\left[\langle\ |\tfrac{1}{2}\{q-\langle q\rangle\,,p-\langle p\rangle\}|\ \rangle\right]^2}_{\geq 0} + \Big[\tfrac{1}{2}\underbrace{\langle\ |\tfrac{1}{\mathrm{i}}[q,p]|\ \rangle}_{=1}\Big]^2 \tag{2.2.11}$$

となり，不等式

$$\delta q\,\delta p \geq \frac{1}{2} \tag{2.2.12}$$

が証明された．これは1927年に発見されたハイゼンベルクの不確定性原理(1928年にワイル*により導かれた形式)であるが，ここではハイゼンベルクの不確定性関係と呼ぶことにしたい．等号が成り立つ必要十分条件は，

$$(p-\langle p\rangle)|\ \rangle = \lambda(q-\langle q\rangle)|\ \rangle,\quad \langle\ |(p-\langle p\rangle) = \lambda^*\langle\ |(q-\langle q\rangle) \tag{2.2.13}$$

および

$$0 = \langle\ |\tfrac{1}{2}\{q-\langle q\rangle\,,p-\langle p\rangle\}|\ \rangle = \tfrac{1}{2}(\lambda+\lambda^*)(\delta q)^2 \tag{2.2.14}$$

が満たされることであり，それゆえ γ を実数として $\lambda=\mathrm{i}\gamma$ と表される．このとき，

$$\underbrace{\langle\ |(p-\langle p\rangle)^2|\ \rangle}_{=(\delta p)^2} = \gamma^2\underbrace{\langle\ |(q-\langle q\rangle)^2|\ \rangle}_{=(\delta q)^2}$$

であるから

$$\gamma = \frac{\delta p}{\delta q} = \frac{1}{2}\frac{1}{(\delta q)^2} = 2(\delta p)^2 \tag{2.2.15}$$

となることに注意しよう．ここで γ が正でなければならないことを予期してこのように選んだ．

---

*Claus Hugo Hermann WEYL (1885–1955)

2.3 最小不確定性の状態

この節では，$\delta q \delta p = \frac{1}{2}$ が成り立つ最適な状況を調べよう．そのために前節で求めた必要十分条件を $\langle q'|$ 成分を用いて表すと

$$\langle q'|\,(p - \langle p\rangle)\,|\ \rangle = \mathrm{i}\gamma\langle q'|\,(q - \langle q\rangle)\,|\ \rangle \tag{2.3.1}$$

となり，微分方程式

$$\left(\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial q'} - \langle p\rangle\right)\psi(q') = \mathrm{i}\gamma\,(q' - \langle q\rangle)\,\psi(q') \tag{2.3.2}$$

を得る．書き換えると

$$\mathrm{d}\log\psi = \frac{\mathrm{d}\psi}{\psi} = [\mathrm{i}\,\langle p\rangle - \gamma\,(q' - \langle q\rangle)]\,\mathrm{d}\,(q' - \langle q\rangle) \tag{2.3.3}$$

となり，直ちに積分できて

$$\psi = C\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,\langle p\rangle\,(q' - \langle q\rangle)}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\gamma\,(q' - \langle q\rangle)^2} \tag{2.3.4}$$

を得る．ψ の規格化によって積分定数 C の値を

$$\begin{aligned}1 = \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}q'\,|\psi|^2 &= |C|^2\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}q'\ \mathrm{e}^{-\gamma\,(q' - \langle q\rangle)^2}\\ &= |C|^2\sqrt{\frac{\pi}{\gamma}} = |C|^2\sqrt{2\pi}\,\delta q\end{aligned} \tag{2.3.5}$$

によって定めると（ここで $\gamma > 0$ であることが本質的であることに注意しよう）

$$\psi(q') = (2\pi)^{-\frac{1}{4}}\frac{1}{\sqrt{\delta q}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,\langle p\rangle\,(q' - \langle q\rangle)}\,\mathrm{e}^{-\frac{(q' - \langle q\rangle)^2}{4(\delta q)^2}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\,\langle p\rangle\,\langle q\rangle} \tag{2.3.6}$$

に達する．ここで位相定数は対称性を見越して導入してある．この式で $q \to p, p \to -q$ と置き換えると，直ちに p 表示の状態

$$\psi(p') = (2\pi)^{-\frac{1}{4}}\frac{1}{\sqrt{\delta p}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\,\langle q\rangle\,(p' - \langle p\rangle)}\,\mathrm{e}^{-\frac{(p' - \langle p\rangle)^2}{4(\delta p)^2}}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\,\langle p\rangle\,\langle q\rangle} \tag{2.3.7}$$

を得るが，この結果はまた以下のようにフーリエ変換でも得ることができる．すなわち

$$\begin{aligned}\psi(p') &= \int \mathrm{e}^{-\mathrm{i}p'q'}\frac{\mathrm{d}q'}{\sqrt{2\pi}}\psi(q')\\ &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}p'\,\langle q\rangle}\int\frac{\mathrm{d}q'}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,(p' - \langle p\rangle)\,(q' - \langle q'\rangle)}\\ &\qquad\qquad \times (2\pi)^{-\frac{1}{4}}\frac{1}{\sqrt{\delta q}}\,\mathrm{e}^{-\frac{(q' - \langle q\rangle)^2}{4(\delta q)^2}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\,\langle p\rangle\,\langle q\rangle}\end{aligned} \tag{2.3.8}$$

において，平方完成すれば，

$$\psi(p') = e^{-i\langle q\rangle(p'-\langle p\rangle)}\, e^{\frac{i}{2}\langle p\rangle\langle q\rangle} \times \frac{1}{\sqrt{\delta q}}\int \frac{dq'}{\sqrt{2\pi}}\, e^{-\frac{1}{4(\delta q)^2}\left[q'-\langle q\rangle+2i(p'-\langle p\rangle)(\delta q)^2\right]^2} \times (2\pi)^{-\frac{1}{4}}\, e^{-(\delta q)^2(p-\langle p\rangle)^2}$$

$$= (2\pi)^{-\frac{1}{4}} \underbrace{\sqrt{2\delta q}}_{=1/\sqrt{\delta p}}\, e^{-i\langle q\rangle(p'-\langle p\rangle)} \underbrace{e^{-(\delta q)^2(p'-\langle p\rangle)^2}}_{=e^{-(p'-\langle p\rangle)^2/(2\delta p)^2}}\, e^{-\frac{i}{2}\langle p\rangle\langle q\rangle} \tag{2.3.9}$$

となり，同じ結果を得る．

以上の結果より，$\langle q'|p''\rangle = (2\pi)^{-\frac{1}{2}} e^{iq'p''}$ や $\langle p'|p''\rangle = \delta(p'-p'')$ などの波動関数が理想化されたものであるということの正確な意味を知ることができるということを示そう．まず最初に

$$\psi(q') = \left[\frac{(2\pi)^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{\delta q}}\, e^{-\frac{i}{2}\langle p\rangle\langle q\rangle}\, e^{-\frac{(q'-\langle q\rangle)^2}{4(\delta q)^2}}\right]\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\, e^{iq'p''} \quad \text{ただし } p'' = \langle p\rangle\ ,$$

$$\psi(p') = \left[(2\pi)^{\frac{1}{4}}\sqrt{2\delta p}\, e^{-\frac{i}{2}\langle p\rangle\langle q\rangle}\, e^{-i\langle q\rangle(p'-p'')}\right]\delta(p'-p'', \delta q) \tag{2.3.10}$$

と記してみよう．ここで現れた関数

$$\delta(p'-p'', \delta p) = \frac{\pi^{-\frac{1}{2}}}{2\delta p}\, e^{-\frac{(p'-p'')^2}{4(\delta p)^2}} \tag{2.3.11}$$

は($p'-p'' = 2x\delta p$ を代入して)規格化の式

$$\int_{-\infty}^{\infty} dp'\,\delta(p'-p'', \delta p) = \frac{1}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{\infty} dx\, e^{-x^2} = 1 \tag{2.3.12}$$

を満たす．さらに $\delta p \to 0$ では，$\delta(p'-p'', \delta p) \to \delta(p'-p'')$ および $e^{-i\langle q\rangle(p'-p'')} \to 1$ となる．またこの極限で $\delta q = 1/\delta p \to \infty$ となるから，$e^{-(q'-\langle q\rangle)^2/(2\delta q)^2} \to 1$ となる．以上より，共通の(任意の小さな)因子を除いて，$\psi(q')$ と $\psi(p')$ がそれぞれちょうど波動関数 $\langle q'|p''\rangle$ および $\langle p'|p''\rangle$ に極限で一致する．

ここでより実際的に，δp が十分小さく $\langle q\rangle\,\delta p \ll 1$ と仮定すると，$1/(2\delta p) = \delta q$ であるから

$$\langle q\rangle \ll \delta q \tag{2.3.13}$$

となり，さらに $\langle q\rangle$ の周りでの q' の変位は

$$|q' - \langle q\rangle\,| \ll \delta q \tag{2.3.14}$$

により制限される．この状況は，$\delta p \to 0, \delta q \to \infty$ という状況と本質的に識別することができない．しかし，$p'-p'' = 0$ での $\delta(p'-p'', \delta p)$ の値は($\sim 1/\delta p$)となって無限大ではなく，$[\delta(p'-p'')]^2$ の積分とは対照的に $|\psi(p')|^2$ の積分は1となる．そして q'

のガウス型関数は $|q'-\langle q\rangle| \sim \delta q$ に対して 1 以下に減少し，その結果として $|\psi(q')|^2$ の積分値が 1 となる．一方これと対照的に $\left|\langle q'|p''\rangle\right|^2$ の積分は無限大となる．

ここで再び最小不確定性の状態($\delta q \delta p = \frac{1}{2}$)の特徴を調べてみよう．この状態は

$$(p-\langle p\rangle)|\ \rangle = \mathrm{i}\frac{\delta p}{\delta q}(q-\langle q\rangle)|\ \rangle \tag{2.3.15}$$

またはこれと等価な表式

$$\left(\frac{q-\langle q\rangle}{\delta q} + \mathrm{i}\frac{p-\langle p\rangle}{\delta p}\right)|\ \rangle = 0 \tag{2.3.16}$$

を満たさなければならない，ここで

$$\left\langle \left(\frac{q-\langle q\rangle}{\sqrt{2}\,\delta q}\right)^2 \right\rangle = \frac{1}{2}\,, \qquad \left\langle \left(\frac{p-\langle p\rangle}{\sqrt{2}\,\delta p}\right)^2 \right\rangle = \frac{1}{2} \tag{2.3.17}$$

および

$$\frac{1}{\mathrm{i}}\left[\frac{q-\langle q\rangle}{\sqrt{2}\,\delta q}, \frac{p-\langle p\rangle}{\sqrt{2}\,\delta p}\right] = \frac{1}{2\delta q\delta p} \times \frac{1}{\mathrm{i}}[q,p] = 1 \tag{2.3.18}$$

に注意しよう．そこで一般性を失うことなく q と p を

$$\frac{q-\langle q\rangle}{\sqrt{2}\,\delta q} \to q\,, \qquad \frac{p-\langle p\rangle}{\sqrt{2}\,\delta p} \to p \tag{2.3.19}$$

と定義し直す．すると

$$\begin{aligned} \langle q\rangle &= 0\,, \qquad (\delta q)^2 = \left\langle q^2 \right\rangle = \frac{1}{2}\,, \\ \langle p\rangle &= 0\,, \qquad (\delta p)^2 = \left\langle p^2 \right\rangle = \frac{1}{2} \end{aligned} \tag{2.3.20}$$

および $\frac{1}{\mathrm{i}}[q,p]=1$ が成り立つから，最小不確定性の状態 $|\ \rangle$ は条件式

$$\underbrace{\frac{1}{\sqrt{2}}(q+\mathrm{i}p)}_{\equiv y}|\ \rangle = 0 \tag{2.3.21}$$

で特徴付けることができる．このように状態 $|\ \rangle$ は 非エルミート演算子 y の固有ベクトルで，固有値が 0 の状態と見なすことができる．それゆえに今後この状態を $|0\rangle$ と表すことにする．ところで $|0\rangle$ をエルミート演算子 $y^\dagger y$ の固有値 0 の固有関数であると見なすこともできる．実際，演算子

$$y^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(q-\mathrm{i}p) \tag{2.3.22}$$

を左から作用すると

$$y^\dagger y|0\rangle = 0 \tag{2.3.23}$$

を得る．これは直前に述べたことと等価である．なぜなら，この結果として

$$0 = \langle 0|y^\dagger y|0\rangle = \left(y|0\rangle\right)^\dagger \left(y|0\rangle\right) \tag{2.3.24}$$

が成り立ち，ベクトル $y|0\rangle$ は **長さがゼロ**（$y|0\rangle = 0$）であると結論できるからである．ここで導入されたエルミート演算子は

$$\begin{aligned} y^\dagger y &= \tfrac{1}{2}(q - \mathrm{i}p)(q + \mathrm{i}p) = \tfrac{1}{2}\Big(q^2 + p^2 - \frac{1}{\mathrm{i}}[q, p]\Big) \\ &= \tfrac{1}{2}\left(q^2 + p^2 - 1\right) \end{aligned} \tag{2.3.25}$$

と表され，さらに

$$\begin{aligned} yy^\dagger &= \tfrac{1}{2}(q + \mathrm{i}p)(q - \mathrm{i}p) = \tfrac{1}{2}\Big(q^2 + p^2 + \frac{1}{\mathrm{i}}[q, p]\Big) \\ &= \tfrac{1}{2}\left(q^2 + p^2 + 1\right) \end{aligned} \tag{2.3.26}$$

に注意すると，交換関係

$$yy^\dagger - y^\dagger y = \left[y, y^\dagger\right] = 1 \tag{2.3.27}$$

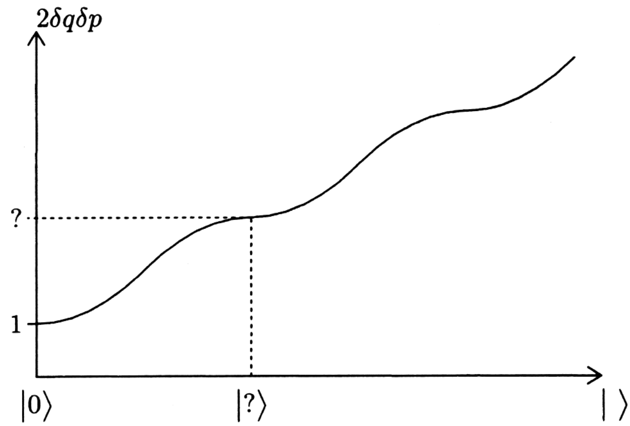
を満たすことがわかる．状態 $|0\rangle$ の q 表示や p 表示の波動関数

$$\psi_0(q') = \pi^{-\frac{1}{4}}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q'^2}\,, \qquad \psi_0(p') = \pi^{-\frac{1}{4}}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}p'^2} \tag{2.3.28}$$

は，式(2.3.6)および(2.3.7)において $\langle q\rangle = \langle p\rangle = 0$ および $\delta q = \delta p = 1/\sqrt{2}$ とすると得られることを思い起こそう．

2.4　停留不確定性の状態

最小値 $2\delta q\delta p = 1$ は，唯一に決まった状態 $|0\rangle$ で達成される．では $2\delta q\delta p$ が最大でも最小でもないが，しかし状態の小さな変化に対してこの値が**停留**しているような状態は存在するだろうか？ この停留状態は模式的には下図のように $|?\rangle$ で表される．



ここで簡単化 $\langle q\rangle = \langle p\rangle = 0$ を再び用いると，定義により

$$(\delta q\,\delta p)^2 = \langle\ |q^2|\ \rangle\langle\ |p^2|\ \rangle\,; \qquad \langle\ |\ \rangle = 1 \tag{2.4.1}$$

となる．微小な変分 $\Delta\langle\ |$ および $\Delta|\ \rangle$ を行うと，

$$\begin{aligned}
\text{(a)}\quad \Delta(\delta q\,\delta p)^2 = &\ \Big(\Delta\langle\ |\Big)\left[q^2(\delta p)^2 + p^2(\delta q)^2\right]|\ \rangle \\
&+ \langle\ |\left[q^2(\delta p)^2 + p^2(\delta q)^2\right]\Big(\Delta|\ \rangle\Big) \stackrel{?}{=} 0 \\
\text{(b)}\qquad\quad \Delta\langle\ |\ \rangle = &\ \Big(\Delta\langle\ |\Big)|\ \rangle + \langle\ |\Big(\Delta|\ \rangle\Big) = 0
\end{aligned} \tag{2.4.2}$$

が導かれる．もう 1 つ許される簡単化 $(\delta q)^2 = (\delta p)^2$ をこの時点で採用する．すると，もし

$$\frac{q^2+p^2}{2}|\ \rangle = \lambda|\ \rangle\,, \qquad \langle\ |\frac{q^2+p^2}{2} = \langle\ |\lambda \tag{2.4.3}$$

が成り立つならば，これと (b) を用いることで (a) が満足されることがわかる．これより $\langle q^2\rangle = \langle p^2\rangle$ が導かれることを後ほど証明する．

$N = y^\dagger y$ と表すと（式 (2.3.25) を参照せよ）

$$\frac{q^2+p^2}{2} = N + \frac{1}{2} \tag{2.4.4}$$

である．そこで $\lambda = n + \frac{1}{2}$ と記すと，$|\ \rangle$ の固有値方程式は

$$N|\ \rangle = |\ \rangle n\,, \qquad \langle\ |N = n\langle\ | \tag{2.4.5}$$

となる．$n = 0$ が固有値であることは知っているが他の固有値は何だろうか？ まず最初に交換関係 (2.3.27) から直ちに導かれる式

$$yN - Ny = \left(yy^\dagger - y^\dagger y\right)y = y \tag{2.4.6}$$

あるいはこれを書き換えた式

$$y(N-1) = Ny\,, \qquad yN = (N+1)y \tag{2.4.7}$$

および，これらのエルミート共役

$$(N-1)y^\dagger = y^\dagger N\,, \qquad Ny^\dagger = y^\dagger(N+1) \tag{2.4.8}$$

を注意深く眺めてみよう．これらの方程式が意味することは，もし n が固有値ならば一般に $n+1$ および $n-1$ も固有値であるということである．このことは，固有値 n の状態 $|n\rangle$ を (2.4.7) の式に作用すると

$$Ny|n\rangle = y(N-1)|n\rangle = y|n\rangle(n-1) \tag{2.4.9}$$

および

$$\langle n|yN = \langle n|(N+1)y = (n+1)\langle n|y \tag{2.4.10}$$

となるから，比例係数を導入して

$$y|n\rangle = |n-1\rangle C_n\,, \qquad \langle n|y = C_{n+1}\langle n+1| \tag{2.4.11}$$

と表すことができることから理解できる．ここで導入した係数は

$$\langle n-1|y|n\rangle = C_n\,, \qquad \langle n|y|n+1\rangle = C_{n+1} \tag{2.4.12}$$

と表されること，および $C_n \geq 0$ とすれば定まり

$$|C_n|^2 = \langle n|\underbrace{y^\dagger y}_{=N}|n\rangle = n \quad したがって \quad C_n = \sqrt{n} \tag{2.4.13}$$

となる．以上より

$$y|n\rangle = |n-1\rangle\sqrt{n}\,, \quad \langle n-1|y = \sqrt{n}\langle n| \tag{2.4.14}$$

および

$$\langle n|y^\dagger = \sqrt{n}\langle n-1|, \quad y^\dagger|n-1\rangle = |n\rangle\sqrt{n} \tag{2.4.15}$$

を得る．不等式

$$n = \langle n|y^\dagger y|n\rangle = \Big(y|n\rangle\Big)^\dagger\Big(y|n\rangle\Big) \geq 0 \tag{2.4.16}$$

より，n には負ではない最小値 n_0 があり，それは $y|n_0\rangle = 0$ を満たすものでなければならないと結論できる．もちろん既出の式から $n_0 = 0$ であること，および N の固有スペクトルは $n = 0, 1, 2, \ldots$ であることが導かれる．

この状態で y, y^2 の期待値は

$$\begin{aligned}\langle n|y|n\rangle &= \sqrt{n+1}\langle n+1|n\rangle = 0\,,\\ \langle n|y^2|n\rangle &= \langle n|yy|n\rangle = \sqrt{n+1}\langle n+1|n-1\rangle\sqrt{n} = 0\end{aligned} \tag{2.4.17}$$

となるが，ここに

$$\begin{aligned}y &= \frac{1}{\sqrt{2}}(q+\mathrm{i}p)\,,\\ y^2 &= \frac{1}{2}(q+\mathrm{i}p)^2 = \frac{q^2-p^2}{2} + \mathrm{i}\frac{qp+pq}{2}\end{aligned} \tag{2.4.18}$$

を代入すると，

$$\langle q\rangle_n = 0\,, \quad \langle p\rangle_n = 0\,, \qquad \big\langle (qp+pq)\big\rangle_n = 0\,, \quad \Big\langle \big(q^2-p^2\big)\Big\rangle_n = 0 \tag{2.4.19}$$

であることがわかる．さらにこの式より

$$(\delta q)_n^2 = (\delta p)_n^2 \tag{2.4.20}$$

を得るが，この結果は式(2.4.3)のすぐあとで証明すると約束していたことである．固有値方程式

$$\tfrac{1}{2}\left(q^2+p^2\right)\big|n\big\rangle=\big|n\big\rangle\left(n+\tfrac{1}{2}\right) \tag{2.4.21}$$

から，不確定性の積 $\delta q\delta p$ の停留値が

$$\left\langle\tfrac{1}{2}\left(q^2+p^2\right)\right\rangle_n=\left\langle q^2\right\rangle_n=(\delta q)_n^2=(\delta q\,\delta p)_n=n+\tfrac{1}{2} \tag{2.4.22}$$

で与えられることがわかる．

固有値 n の固有ベクトルは

$$\big\langle n\big|=\big\langle n-1\big|\frac{y}{\sqrt{n}}=\big\langle n-2\big|\frac{y}{\sqrt{n-1}}\frac{y}{\sqrt{n}}=\cdots=\big\langle 0\big|\frac{y^n}{\sqrt{n!}} \tag{2.4.23}$$

および

$$\big|n\big\rangle=\frac{(y^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}\big|0\big\rangle \tag{2.4.24}$$

と表される．これらの記号的な表式を波動関数によって数値的に表すと

$$\begin{aligned}\psi_n(q')=\big\langle q'\big|n\big\rangle&=\big\langle q'\big|\frac{(q-\mathrm{i}p)^n}{\sqrt{2^n n!}}\big|0\big\rangle\\&=\left(2^n\,n!\right)^{-\frac{1}{2}}\left(q'-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q'}\right)^n\big\langle q'\big|0\big\rangle\\&=\left(2^n\,n!\right)^{-\frac{1}{2}}\left(q'-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q'}\right)^n\pi^{-\frac{1}{4}}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q'^2}\end{aligned} \tag{2.4.25}$$

および

$$\begin{aligned}\psi_n(p')=\big\langle p'\big|n\big\rangle&=\big\langle p'\big|\frac{(q-\mathrm{i}p)^n}{\sqrt{2^n n!}}\big|0\big\rangle\\&=(-\mathrm{i})^n\left(2^n\,n!\right)^{-\frac{1}{2}}\left(p'-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p'}\right)^n\big\langle p'\big|0\big\rangle\\&=(-\mathrm{i})^n\left(2^n\,n!\right)^{-\frac{1}{2}}\left(p'-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p'}\right)^n\pi^{-\frac{1}{4}}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}p'^2}\end{aligned} \tag{2.4.26}$$

となる．これらの波動関数はフーリエ変換

$$\psi_n(p')=\int\mathrm{d}q'\,\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p'q'}}{\sqrt{2\pi}}\,\psi_n(q') \tag{2.4.27}$$

によって結び付いている．この式が一般的に成り立っていることは，まず $n=0$ で正しいことを確かめ，さらに変換

$$\int\mathrm{d}q'\;\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p'q'}\left(q'-\frac{\partial}{\partial q'}\right)\cdots=-\mathrm{i}\left(p'-\frac{\partial}{\partial p'}\right)\int\mathrm{d}q'\;\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p'q'}\cdots \tag{2.4.28}$$

を n 回繰り返すことで証明できる．

2.5　エルミートの多項式

ところで恒等式

$$q' - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q'} = \mathrm{e}^{\frac{1}{2}q'^2}\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q'}\right)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q'^2} \tag{2.5.1}$$

から，さらに

$$\left(q' - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q'}\right)^n = \mathrm{e}^{\frac{1}{2}q'^2}\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q'}\right)^n\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q'^2} \tag{2.5.2}$$

が導かれ，したがって前節で求めた波動関数は

$$\psi_n(q') = \frac{\pi^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{2^n n!}}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}q'^2}\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q'}\right)^n\mathrm{e}^{-q'^2} \tag{2.5.3}$$

と表されることがわかる．ここで n 次のエルミートの多項式 $\mathrm{H}_n(q')$ を

$$\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q'}\right)^n\mathrm{e}^{-q'^2} = \mathrm{H}_n(q')\,\mathrm{e}^{-q'^2} \tag{2.5.4}$$

と定義すると，波動関数は

$$\psi_n(q') = \frac{\pi^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{2^n n!}}\mathrm{H}_n(q')\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q'^2} \tag{2.5.5}$$

および

$$\psi_n(p') = (-\mathrm{i})^n\frac{\pi^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{2^n n!}}\mathrm{H}_n(p')\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}p'^2} \tag{2.5.6}$$

と表すことができる．次数の低いエルミートの多項式のいくつかを具体的に書き表すと

$$\begin{aligned} &\mathrm{H}_0(q') = 1\,, && \mathrm{H}_3(q') = (2q')^3 - 6(2q')\,, \\ &\mathrm{H}_1(q') = 2q'\,, && \mathrm{H}_4(q') = (2q')^4 - 12(2q')^2 + 12\,, \\ &\mathrm{H}_2(q') = (2q')^2 - 2\,, && \mathrm{H}_5(q') = (2q')^5 - 20(2q')^3 + 60(2q') \end{aligned} \tag{2.5.7}$$

などとなる．$\mathrm{H}_n(q')$ の最高ベキは $(2q')^n$ であり，さらに一般に

$$\mathrm{H}_n(-q') = (-1)^n\mathrm{H}_n(q') \tag{2.5.8}$$

が成り立つ．定義式(2.5.4)から直ちに得られる微分漸化式

$$-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q'}\left(\mathrm{H}_n(q')\,\mathrm{e}^{-q'^2}\right) = \mathrm{H}_{n+1}(q')\,\mathrm{e}^{-q'^2} \tag{2.5.9}$$

すなわち

$$\mathrm{H}_{n+1}(q') = \left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q'} + 2q'\right)\mathrm{H}_n(q') \tag{2.5.10}$$

を用いると，すべてのエルミートの多項式を次々と作り出すことができる．これとは異なった微分漸化式を求めるために，微分を実行すると

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q'}\left(\mathrm{H}_n(q')\,\mathrm{e}^{-q'^2}\right) = (-1)^n\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q'}\right)^n(-2q')\,\mathrm{e}^{-q'^2}$$
$$= -2q'\mathrm{H}_n(q')\,\mathrm{e}^{-q'^2} + 2n\mathrm{H}_{n-1}(q')\,\mathrm{e}^{-q'^2} \tag{2.5.11}$$

と表されることから，第 2 の漸化式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q'}\mathrm{H}_n(q') = 2n\mathrm{H}_{n-1}(q') \tag{2.5.12}$$

を得る．これら 2 つの漸化式を組み合わせると

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q'}\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q'} + 2q'\right)\mathrm{H}_n(q') = 2(n+1)\mathrm{H}_n(q') \tag{2.5.13}$$

となり，エルミートの多項式のしたがう微分方程式

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}q'^2} - 2q'\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q'} + 2n\right)\mathrm{H}_n(q') = 0 \tag{2.5.14}$$

に達する．

もちろん，この方程式は固有値方程式(2.4.21)を微分形で表した方程式

$$\frac{1}{2}\left(q'^2 - \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}q'^2}\right)\psi_n(q') = (n+\tfrac{1}{2})\psi_n(q') \tag{2.5.15}$$

から導かれなければならない．実際，$\psi_n(q')$ を $\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q'^2}\mathrm{H}_n(q')$ で置き換え，

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}q'^2} - q'^2\right)\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q'^2}\mathrm{H}_n(q') = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q'^2}\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}q'^2} - 2q'\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q'} + 2n\right)\mathrm{H}_n(q') \tag{2.5.16}$$

となることを考慮すると，確かに方程式(2.5.14)を導出できる．

この節の後半では，多項式の因数分解の表現

$$\mathrm{H}_n(q') = 2^n\prod_{k=1}^{n}(q' - q_k) \tag{2.5.17}$$

に達する方法について論じることにする．ここで q_k $(k = 1,\cdots,n)$ は次数 n の多項式の n 個のゼロ点を表している．まず

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q'}\mathrm{H}_n(q') = \phi_n(q')\mathrm{H}_n(q') \tag{2.5.18}$$

によって ϕ_n を定義すると，直ちに ϕ_n の一般形

$$\phi_n(q') = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q'}\log\mathrm{H}_n(q') = \sum_k\frac{1}{q' - q_k} \tag{2.5.19}$$

を得る．さらに微分すると

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}q'^2}\mathrm{H}_n(q') = \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q'}\phi_n(q') + [\phi_n(q')]^2\right)\mathrm{H}_n(q') \tag{2.5.20}$$

となり，エルミートの多項式の微分方程式を考慮すると，ϕ_n に対する 1 階非線形微分方程式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q'}\phi_n(q') + [\phi_n(q')]^2 - 2q'\phi_n(q') + 2n = 0 \tag{2.5.21}$$

を得る．この式に ϕ_n の一般形を代入すると

$$-\sum_k \frac{1}{(q'-q_k)^2} + \sum_{k,l}\frac{1}{q'-q_k}\frac{1}{q'-q_l} - 2\sum_k \frac{q'}{q'-q_k} + 2n = 0 \tag{2.5.22}$$

となる．恒等式

$$\sum_k \frac{q'}{q'-q_k} - n = \sum_k \frac{q'-(q'-q_k)}{q'-q_k} = \sum_k \frac{q_k}{q'-q_k} \tag{2.5.23}$$

および

$$\begin{aligned}\sum_{k,l}\frac{1}{q'-q_k}\frac{1}{q'-q_l} - \sum_k \frac{1}{(q'-q_k)^2} &= \sum_{k\neq l}\frac{1}{q'-q_k}\frac{1}{q'-q_l}\\ &= \sum_{k\neq l}\left(\frac{1}{q'-q_k} - \frac{1}{q'-q_l}\right)\frac{1}{q_k-q_l}\\ &= 2\sum_k \frac{1}{q'-q_k}\sum_{l(\neq k)}\frac{1}{q_k-q_l}\end{aligned} \tag{2.5.24}$$

を用いると基本的な関係式

$$q_k = \sum_{l(\neq k)}\frac{1}{q_k-q_l} \tag{2.5.25}$$

を得る．これから直ちに次の 2 つの一般的な結果

$$\sum_k q_k = \sum_{k\neq l}\frac{1}{q_k-q_l} = 0 \tag{2.5.26}$$

および

$$\sum_k q_k^2 = \sum_{k\neq l}\frac{\frac{1}{2}(q_k+q_l)+\frac{1}{2}(q_k-q_l)}{q_k-q_l} = \frac{1}{2}(n-1)n \tag{2.5.27}$$

を得る．ここで式(2.5.26)は q_k がゼロ点ならば $-q_k$ もゼロ点であるという対称性(2.5.8)を用いている．

まず n が偶数で $n=2r$ であるとすると，大きさが異なる r 個の正負のゼロ点の対が存在する．そこで q_k と同符号のゼロ点と異符号のゼロ点の和に分解して

$$q_k = \sum_{l(\neq k)=1}^{r}\frac{1}{q_k-q_l} + \sum_{l(\neq k)=1}^{r}\frac{1}{q_k+q_l} + \frac{1}{2q_k} \tag{2.5.28}$$

と表し，両辺を q_k で割ると

$$1 = 2\sum_{l(\neq k)=1}\frac{1}{q_k^2-q_l^2} + \frac{1}{2q_k^2} \qquad (k=1,2,\ldots,r) \tag{2.5.29}$$

となり，これらを $k=1,\ldots,r$ について加えると，和則

$$r = \frac{1}{2}\sum_{k=1}^{r}\frac{1}{q_k^2} \tag{2.5.30}$$

を得る．

最初の自明ではない例 $n=2$, $r=1$ では，$q_1^2=\frac{1}{2}$ であることが直ちにわかり，したがって $\mathrm{H}_2 = 2^2(q'^2-q_1^2) = (2q')^2-2$ を得る．

次に $n=4$, $r=2$ の場合を調べると，まず

$$1 = 2\frac{1}{q_1^2-q_2^2}+\frac{1}{2q_1^2}\,, \qquad 1 = -2\frac{1}{q_1^2-q_2^2}+\frac{1}{2q_2^2} \tag{2.5.31}$$

が成り立つから，

$$2 = \frac{1}{2q_1^2}+\frac{1}{2q_2^2} \quad \text{すなわち} \quad q_1^2+q_2^2 = 4q_1^2q_2^2 \tag{2.5.32}$$

および

$$\frac{4}{q_1^2-q_2^2} = \frac{1}{2q_2^2}-\frac{1}{2q_1^2} \quad \text{すなわち} \quad \left(q_1^2-q_2^2\right)^2 = 8q_1^2q_2^2 \tag{2.5.33}$$

を得る．2つのゼロ点の2乗の比を x とおくと，q_1^2 と q_2^2 は $\frac{1}{4}(1+x)$ で与えられ，x は $(x-1)^2=8x$ から求まり，結局

$$q_1^2 = \tfrac{3}{2}-\sqrt{\tfrac{3}{2}}\,, \qquad q_2^2 = \tfrac{3}{2}+\sqrt{\tfrac{3}{2}} \tag{2.5.34}$$

となる．したがって，

$$\begin{aligned} H_4 &= 2^4\left(q'^2-\tfrac{3}{2}+\sqrt{\tfrac{3}{2}}\right)\left(q'^2-\tfrac{3}{2}-\sqrt{\tfrac{3}{2}}\right) \\ &= 2^4\left(q'^4-3q'^2+\tfrac{3}{4}\right) = (2q')^4-12(2q')^2+12 \end{aligned} \tag{2.5.35}$$

を得る．

もし n が奇数で $n=2r+1$ であるとすると，r 個の正負のゼロ点の対と 0 がゼロ点となる．ここでゼロ点の和を上と同様に分解して

$$q_k = \sum_{l\neq k=1}^{r}\frac{1}{q_k-q_l}+\frac{1}{q_k}+\sum_{l\neq k=1}^{r}\frac{1}{q_k+q_l}+\frac{1}{2q_k} \tag{2.5.36}$$

とし，以前と同様にまとめ直して両辺を q_k で割り，さらに加えれば

$$1 = 2\sum_{l\neq q}\frac{1}{q_k^2-q_l^2}+\frac{3}{2q_k^2}\,, \qquad r = \frac{3}{2}\sum_{k=1}^{r}\frac{1}{q_k^2} \tag{2.5.37}$$

を得る．

簡単な例 $n=3$, $r=1$ の場合には $q_1^2=\frac{3}{2}$ となり，

$\mathrm{H}_3 = 2^3 q' \left(q' - \frac{3}{2}\right) = (2q')^3 - 6(2q')$ を得る．

次に $n = 5$, $r = 2$ の場合には，

$$1 = 2\frac{1}{q_1^2 - q_2^2} + \frac{3}{2}\frac{1}{q_1^2}\,, \qquad 1 = -2\frac{1}{q_1^2 - q_2^2} + \frac{3}{2}\frac{1}{q_2^2} \tag{2.5.38}$$

より，

$$3\left(q_1^2 + q_2^2\right) = 4q_1^2 q_2^2\,, \qquad 3\left(q_1^2 - q_2^2\right)^2 = 8q_1^2 q_2^2 \tag{2.5.39}$$

となる．これを以前と同様に変数 x を導入すると，q_1^2 と q_2^2 は $\frac{3}{4}(1+x)$ で与えられ，$(x-1)^2 = \frac{8}{3}x$ を解いて

$$q_1^2 = \frac{5}{2} - \sqrt{\frac{5}{2}}\,, \qquad q_2^2 = \frac{5}{2} + \sqrt{\frac{5}{2}} \tag{2.5.40}$$

を得るから，結局 $n = 5$ のエルミートの多項式は

$$\begin{aligned} \mathrm{H}_5 &= 2^5 q' \left(q'^2 - \frac{5}{2} + \sqrt{\frac{5}{2}}\right)\left(q'^2 - \frac{5}{2} - \sqrt{\frac{5}{2}}\right) \\ &= (2q')^5 - 20(2q')^3 + 60(2q') \end{aligned} \tag{2.5.41}$$

となる．このように(2.5.7)のすべてのエルミートの多項式は式(2.5.17)の形で記述されることが確かめられた．

2.6　停留不確定性の状態の完全性

ベクトル $\big|n\big\rangle$ および $\big\langle n\big|$ が完全であり，N の固有値は $n = 0, 1, 2, \ldots$ 以外に存在しないことを，どのようにして知ることができるだろうか？ このことは

$$\sum_{n=0}^{\infty} \big|nn\big| = 1 \tag{2.6.1}$$

が成り立つか否かを問うことでもある．この問題の答えを得るために，まず $\big|nn\big|$ を N の代数的関数として表示することから始めよう．記号 $\big|00\big|$ は，N が 0 ならば値 1 を持ち，それ以外であれば値 0 を持たなければならない．負でない整数 $n = 0, 1, 2, \ldots$ の関数で，このような振る舞いをする式は

$$(1-1)^n = \begin{cases} 1 & (n = 0)\,, \\ 0 & (n = 1, 2, \ldots) \end{cases} \tag{2.6.2}$$

であることに注意しよう．したがって，n を N で置き換えて 2 項展開を用いると

$$\big|00\big| = \sum_{k=0}^{\infty} (-1)^k \frac{N!}{k!(N-k)!} = 1 - N + \frac{N(N-1)}{2} + \cdots \tag{2.6.3}$$

と表すことができる．同様に

$$n(1-1)^{n-1} = \begin{cases} 1 & (n=1)\ , \\ 0 & (n=0,2,3\ldots) \end{cases} \tag{2.6.4}$$

および

$$\tfrac{1}{2}n(n-1)(1-1)^{n-2} = \begin{cases} 1 & (n=2)\ , \\ 0 & (n=0,1,3\ldots) \end{cases} \tag{2.6.5}$$

などが成り立つ．したがって，これらの式を 2 項展開すると

$$\begin{aligned} \big|11\big| &= \sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k \frac{N!}{k!(N-1-k)!} = N - N(N-1) + \cdots\ , \\ \big|22\big| &= \sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k \frac{1}{2}\frac{N!}{k!(N-2-k)!} = \tfrac{1}{2}N(N-1) + \cdots\ , \\ \big|nn\big| &= \sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k \frac{1}{n!}\frac{N!}{k!(N-n-k)!} \end{aligned} \tag{2.6.6}$$

などを得る．この結果を用いて和を計算すると

$$\begin{aligned} \sum_{n=0}^{\infty}\big|nn\big| &= \sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k \frac{1}{k!}\frac{N!}{(N-k)!}\underbrace{\sum_{n=0}^{\infty}\frac{(N-k)!}{n!(N-k-n)!}}_{=(1+1)^{N-k}} \\ &= \sum_{k=0}^{\infty}\frac{N!}{k!(N-k)!}(-1)^k 2^{N-k} = (2-1)^N = 1^N = 1 \end{aligned} \tag{2.6.7}$$

となり，完全性が証明された．

この完全性は，式(2.4.23)および(2.4.24)の演算子を用いた表現

$$\big|nn\big| = \frac{(y^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle\langle 0|\frac{y^n}{\sqrt{n!}} = \frac{1}{n!}(y^\dagger)^n\big|00\big|y^n \tag{2.6.8}$$

および

$$\sum_{n=0}^{\infty}\big|nn\big| = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(y^\dagger)^n\big|00\big|y^n \equiv \exp\left(y^\dagger;\big|00\big|;y\right) \tag{2.6.9}$$

とは，どのように関係しているであろうか？ ここでの記法は，左側に $y^\dagger$ のベキ，右側に y のベキ，そしてその間に $\big|00\big|$ を挿入するという操作を表すために導入した．さらに $\big|00\big|$ を演算子で表すための準備をする．まず $y^\dagger y = N$ であり，そして

$$(y^\dagger)^2 y^2 = y^\dagger N y = y^\dagger y(N-1) = N(N-1) \tag{2.6.10}$$

さらに

$$\begin{aligned} (y^\dagger)^3 y^3 &= y^\dagger N(N-1)y = y^\dagger N y(N-2) = y^\dagger y(N-1)(N-2) \\ &= N(N-1)(N-2) \end{aligned} \tag{2.6.11}$$

などよりわかるように，一般に

$$(y^\dagger)^k y^k = \frac{N!}{(N-k)!} \tag{2.6.12}$$

が成り立つことに注意しよう．すると，$\big|00\big|$ は

$$\begin{aligned}\big|00\big| &= \sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k \frac{N!}{k!(N-k)!} = \sum_{k=0}^{\infty}(-1)^k \frac{(y^\dagger)^k y^k}{k!} \\ &\equiv \exp\left(-y^\dagger; y\right)\end{aligned} \tag{2.6.13}$$

と基本的な正規順序化された指数関数で記すことができる．これより完全性

$$\sum_{n=0}^{\infty}\big|nn\big| = \exp\Big(y^\dagger; \exp\left(-y^\dagger; y\right); y\Big) = 1 \tag{2.6.14}$$

を得る．なぜならば，この2つの正規順序化された指数関数は互いに逆関数になっているからである．もし $y^\dagger$ と y の非可換性を考える必要がなければ，このことは明らかである．しかし実際のところ，すべての $y^\dagger$ は左側にあり，すべての y は右側にあるので，非可換性はまったく問題とはならない．このことを最初の数項で調べてみると以下のようである．

$$\begin{aligned}\exp\Big(y^\dagger; \exp\left(-y^\dagger; y\right); y\Big) &= \mathrm{e}^{-y^\dagger; y} + y^\dagger\, \mathrm{e}^{-y^\dagger; y} y + \frac{1}{2} {y^\dagger}^2\, \mathrm{e}^{-y^\dagger; y} y^2 + \cdots \\ &= (1 - y^\dagger y + \frac{1}{2} {y^\dagger}^2 y^2 + \cdots) \\ &\quad + y^\dagger(1 - y^\dagger y + \cdots)y + \frac{1}{2}{y^\dagger}^2(1+\cdots)y^2 + \cdots \\ &= 1\,.\end{aligned} \tag{2.6.15}$$

2.7 非エルミート演算子の固有ベクトル

しかしながら演算子を数で置き換えれば，ものごとはさらにたちまち明白になるであろう．このことは演算子 y および $y^\dagger$ の固有ベクトルと固有値を

$$y|y'\rangle = |y'\rangle y', \qquad \langle {y^\dagger}'|y^\dagger = {y^\dagger}'\langle {y^\dagger}'| \tag{2.7.1}$$

によって導入すると，

$$\begin{aligned}\langle {y^\dagger}'|\Big(\sum_n \big|nn\big|\Big)|y'\rangle &= \langle {y^\dagger}'|\, \mathrm{e}^{{y^\dagger}' y'}\, \mathrm{e}^{-{y^\dagger}' y'}\, |y'\rangle \\ &= \langle {y^\dagger}'|1|y'\rangle\end{aligned} \tag{2.7.2}$$

となり，納得がいくであろう．

これらの演算子はゼロ固有値を持ち

$$y\big|0\big\rangle = 0, \qquad \big\langle 0\big|y^\dagger = 0 \tag{2.7.3}$$

が成り立つことをすでに知っている．これらの演算子の一般的な固有関数を得るには，固有値を $0 \to y', 0 \to y^{\dagger\prime}$ と変化しさえすればよいことが以下のようにしてわかる．この状況と似たことは実はすでによく知っていることである．実際(1.16.19)にある表式のエルミート共役

$$\big|q' + q''\big\rangle = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}q''p}\big|q'\big\rangle, \quad \big\langle p' + p''\big| = \big\langle p'\big|\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p''q} \tag{2.7.4}$$

は，q および p の固有値を変化させる演算子であることを示している．これらの表式は交換関係 $[q,p] = \mathrm{i}$ の結果である．ところが $[y, \mathrm{i}y^\dagger] = \mathrm{i}$ に着目すると，$q \to y, p \to \mathrm{i}y^\dagger$ とする類推が思い浮かぶだろう．それゆえに対応

$$\begin{aligned} q' \to 0\,,\ q'' \to y',\ p \to \mathrm{i}y^\dagger: \quad & \big|y'\big\rangle &= \mathrm{e}^{y^\dagger y'}\big|0\big\rangle\,, \\ p' \to 0\,,\ p'' \to \mathrm{i}y^{\dagger\prime},\ q \to y: \quad & \big\langle y^{\dagger\prime}\big| &= \big\langle 0\big|\,\mathrm{e}^{y^{\dagger\prime}y} \end{aligned} \tag{2.7.5}$$

が成り立つと期待できる．しかしベクトル $\big|q'\big\rangle, \big\langle p'\big|$ とは異なって，$\big|y'\big\rangle, \big\langle y^{\dagger\prime}\big|$ はエルミート共役の関係にはない．

まず最初に注意すべきことは，

$$y\big|y'\big\rangle = \big|y'\big\rangle y' \tag{2.7.6}$$

のエルミート共役は

$$\big|y'\big\rangle^\dagger y^\dagger = y'^*\big|y'\big\rangle^\dagger \tag{2.7.7}$$

であり，したがって

$$\big|y'\big\rangle^\dagger = \big\langle y^{\dagger\prime}\big| \qquad (y^{\dagger\prime} = y'^*) \tag{2.7.8}$$

となることである．非エルミート演算子 $y = 2^{-\frac{1}{2}}(q + \mathrm{i}p)$ の固有値は複素数であることは明らかである．なぜならば，たとえはじめに固有値が実数であると考えても，$\overline{y} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}y, \overline{y}^\dagger = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}y^\dagger, [\overline{y}, \overline{y}^\dagger] = 1$ が成り立ち，$\overline{y}, \overline{y}^\dagger$ もまた非エルミート演算子の完全に正当な対であり，しかも複素固有値 $\overline{y}' = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}y'$ を持つからである．そこで複素固有値を認めることにすると，式(2.7.6)は

$$\left(\mathrm{e}^{y^\dagger y'}\big|0\big\rangle\right)^\dagger = \big\langle 0\big|\,\mathrm{e}^{y^{\dagger\prime}y} \qquad (y^{\dagger\prime} = y'^*) \tag{2.7.9}$$

と表される．

この類推によって導かれた結果が正しいことをこれから確かめることにしよう．まず

$$y\big|y'\big\rangle = y\,\mathrm{e}^{y^\dagger y'}\big|0\big\rangle = \mathrm{e}^{y^\dagger y'}\left(\mathrm{e}^{-y^\dagger y'}y\,\mathrm{e}^{y^\dagger y'}\right)\big|0\big\rangle \tag{2.7.10}$$

と表されることに注意する．次に微分方程式

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y'}\left(\mathrm{e}^{-y^\dagger y'}y\,\mathrm{e}^{y^\dagger y'}\right) &= \mathrm{e}^{-y^\dagger y'}y\left(y^\dagger\,\mathrm{e}^{y^\dagger y'}\right) + \left(\mathrm{e}^{-y^\dagger y'}(-y^\dagger)\right)y\,\mathrm{e}^{y^\dagger y'}\\ &= \mathrm{e}^{-y^\dagger y'}\underbrace{[y,y^\dagger]}_{=1}\mathrm{e}^{y^\dagger y'} = 1\end{aligned} \tag{2.7.11}$$

を積分定数に配慮しながら解くと，

$$\mathrm{e}^{-y^\dagger y'}y\,\mathrm{e}^{y^\dagger y'} = y' + y \tag{2.7.12}$$

を得る．すると

$$\mathrm{e}^{y^\dagger y'}(y' + \underset{\substack{\downarrow\\ 0}}{y})\big|0\big\rangle = \mathrm{e}^{y^\dagger y'}\big|0\big\rangle y' = \big|y'\big\rangle y' \tag{2.7.13}$$

であるから，$y\big|y'\big\rangle = \big|y'\big\rangle y'$ を確かめることができた．

固有ベクトルは式(2.4.24)を用いると

$$\big|y'\big\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(y^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}\frac{(y')^n}{\sqrt{n!}}\big|0\big\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\big|n\big\rangle\frac{(y')^n}{\sqrt{n!}} \tag{2.7.14}$$

と表され，この式のエルミート共役をとると $(y'^* \to y^{\dagger\prime})$

$$\big\langle y^{\dagger\prime}\big| = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(y^{\dagger\prime})^n}{\sqrt{n!}}\big\langle n\big| \tag{2.7.15}$$

となり，これらの式から

$$\big\langle y^{\dagger\prime}\big|y''\big\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(y^{\dagger\prime})^n}{\sqrt{n!}}\frac{(y'')^n}{\sqrt{n!}} = \mathrm{e}^{y^{\dagger\prime}y''} \tag{2.7.16}$$

を得る．これは数値因子を除いて

$$\big\langle p'\big|q'\big\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p'q'} \tag{2.7.17}$$

と類似している．特別な例

$$\big\langle 0\big|y'\big\rangle = 1, \qquad \big\langle y^{\dagger\prime}\big|0\big\rangle = 1 \tag{2.7.18}$$

に注意しよう．

演算子 y, $y^\dagger$ の固有ベクトルは，n 状態での成分

$$\big\langle n\big|y'\big\rangle = \frac{(y')^n}{\sqrt{n!}}, \qquad \big\langle y^{\dagger\prime}\big|n\big\rangle = \frac{(y^{\dagger\prime})^n}{\sqrt{n!}} \tag{2.7.19}$$

によって表される．結局，抽象的な n ベクトル(2.4.23)と(2.4.24)が y' と $y^{\dagger\prime}$ を変数とする波動関数で表されたことは明らかである．実際，式(2.4.24)から，

$$\langle y^{\dagger\prime}|n\rangle = \langle y^{\dagger\prime}|\frac{(y^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle = \frac{(y^{\dagger\prime})^n}{\sqrt{n!}}\underbrace{\langle y^{\dagger\prime}|0\rangle}_{=1} \tag{2.7.20}$$

を得る．そして $\langle y^{\dagger\prime}|0\rangle = 1$ の意味はベクトルの性質

$$y|0\rangle = 0 \tag{2.7.21}$$

を数値的に実現したものであることが以下のように理解できる．まず最初に等式

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial y^{\dagger\prime}}\langle y^{\dagger\prime}| &= \frac{\partial}{\partial y^{\dagger\prime}}\langle 0|\,\mathrm{e}^{y^{\dagger\prime}y} = \langle 0|\,\mathrm{e}^{y^{\dagger\prime}y}y \\ &= \langle y^{\dagger\prime}|y\end{aligned} \tag{2.7.22}$$

に注意しよう．この式は

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial p'}\langle p'| = \langle p'|q \tag{2.7.23}$$

と類似している．ところで式(2.7.22)から

$$\frac{\partial}{\partial y^{\dagger\prime}}\langle y^{\dagger\prime}|0\rangle = \langle y^{\dagger\prime}|y|0\rangle = 0 \tag{2.7.24}$$

となり，この微分方程式を解くと

$$\langle y^{\dagger\prime}|0\rangle = \langle 0|0\rangle = 1 \tag{2.7.25}$$

となるからである．

これらの波動関数を理解したうえで，等式

$$\langle y^{\dagger\prime}|y''\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(y^{\dagger\prime})^n}{\sqrt{n!}}\frac{(y'')^n}{\sqrt{n!}} = \sum_{n=0}^{\infty}\langle y^{\dagger\prime}|n\rangle\langle n|y''\rangle \tag{2.7.26}$$

が n 状態の完全性の性質を再現していることがわかる．

ベクトル $|y'\rangle$ の q' 表示 $\langle q'|y'\rangle$ が何であるかを調べるために，まず微分演算子を

$$\frac{\partial}{\partial q'}\langle q'| = \langle q'|\mathrm{i}p, \qquad \frac{\partial}{\partial y'}|y'\rangle = y^\dagger|y'\rangle \tag{2.7.27}$$

とする．後者の微分演算子は式(2.7.22)での $\langle y^{\dagger\prime}|$ についての結果のエルミート共役であり，$(\partial/\partial q')|q'\rangle = -\mathrm{i}p|q'\rangle$ と類似している．そこで，これらを用いると

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial q'}\langle q'|y'\rangle &= \langle q'|\mathrm{i}p|y'\rangle = \langle q'|\left(\sqrt{2}\,y - q\right)|y'\rangle \\ &= \left(\sqrt{2}\,y' - q'\right)\langle q'|y'\rangle\end{aligned} \tag{2.7.28}$$

および

$$\frac{\partial}{\partial y'}\langle q'|y'\rangle = \langle q'|y^\dagger|y'\rangle = \langle q'|\left(\sqrt{2}\,q - y\right)|y'\rangle$$
$$= \left(\sqrt{2}\,q' - y'\right)\langle q'|y'\rangle \tag{2.7.29}$$

が得られ，これらの偏微分方程式を解くと

$$\langle q'|y'\rangle = C\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q'^2 + \sqrt{2}\,q'y' - \frac{1}{2}y'^2} \tag{2.7.30}$$

を得る．また，この複素共役は

$$\langle y^{\dagger\prime}|q'\rangle = C^*\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q'^2 + \sqrt{2}\,q'y^{\dagger\prime} - \frac{1}{2}(y^{\dagger\prime})^2} \tag{2.7.31}$$

となる．

積分定数 C はいくつかの方法で決定することができる．その 1 つの方法は，$y' = 0$ とおくとすでに知られた波動関数を与えることから

$$\psi_0(q') = \pi^{-\frac{1}{4}}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q'^2}\,,\quad \text{それゆえ}\quad C = \pi^{-\frac{1}{4}} \tag{2.7.32}$$

と決まる．別の方法として，q' 状態の完全性を用いると

$$\begin{aligned}\langle y^\dagger|y''\rangle &= \int\langle y^{\dagger\prime}|q'\rangle\mathrm{d}q'\langle q'|y''\rangle\\ &= |C|^2\int\mathrm{d}q'\,\mathrm{e}^{-q'^2 + \sqrt{2}\,q'(y^{\dagger\prime} + y'') - \frac{1}{2}(y^{\dagger\prime 2} + y''^2)}\\ &= |C|^2\underbrace{\int\mathrm{d}q'\,\mathrm{e}^{-[q' - (y^{\dagger\prime} + y'')/\sqrt{2}]^2}}_{=\sqrt{\pi}}\underbrace{\mathrm{e}^{y^{\dagger\prime}y''}}_{=\langle y^\dagger|'y''\rangle}\end{aligned} \tag{2.7.33}$$

となり，再び(不定の位相を除いて) $C = \pi^{-\frac{1}{4}}$ を得る．

多くの基底が関与する変換関数 $\langle q'|y'\rangle$ の 1 つの応用として，n 状態を

$$\langle q'|y'\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\langle q'|n\rangle\langle n|y'\rangle \tag{2.7.34}$$

によって導入する．その結果

$$\pi^{-\frac{1}{4}}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q'^2 + \sqrt{2}\,q'y' - \frac{1}{2}y'^2} = \sum_{n=0}^{\infty}\psi_n(q')\frac{(y')^n}{\sqrt{n!}} \tag{2.7.35}$$

を得る．これは ψ_n の母関数であり，ψ_n は y' のベキ展開の係数として現れる．そこで左辺をテーラー*展開して ψ_n を取り出すと

---

*Brook TAYLOR (1685–1731)

$$\psi_n(q') = \frac{1}{\sqrt{n!}}\pi^{-\frac{1}{4}}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}y'}\right)^n \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\left(y'-\sqrt{2}q'\right)^2}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}q'^2}\bigg|_{y'=0}$$
$$= \frac{1}{\sqrt{n!}}\pi^{-\frac{1}{4}}\,\mathrm{e}^{\frac{1}{2}q'^2}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}(-\sqrt{2}q')}\right)^n \mathrm{e}^{-q'^2}$$
$$= \frac{\pi^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{2^n n!}}\mathrm{e}^{\frac{1}{2}q'^2}\left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}q'}\right)^n \mathrm{e}^{-q'^2}$$
$$= \frac{\pi^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{2^n n!}}\mathrm{H}_n(q')\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q'^2} \tag{2.7.36}$$

となり，以前に得た結果(2.5.5)と確かに一致する．

状態 $|y'\rangle$, $\langle y^{\dagger\prime}|$ の物理的解釈についてさらに論じるに当たって，これらのベクトルの長さを求めると

$$y^{\dagger\prime} = y'^{*}: \qquad \langle y^{\dagger\prime}|y'\rangle = \mathrm{e}^{|y'|^2} \geq 1 \tag{2.7.37}$$

となり，$|0\rangle$ 以外は有限の長さではあるが単位長さではないという事実に注意しなければならない．したがって，規格化されたベクトルは

$$|q',p'\rangle = |y'\rangle\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|y'|^2} \quad ここで \quad y' = \frac{1}{\sqrt{2}}(q'+\mathrm{i}p') \tag{2.7.38}$$

であり（この状態はグラウバー*により案出された**コヒーレント状態**という名称でしばしば呼ばれている），この状態での期待値は

$$\langle X\rangle_{q',p'} = \mathrm{e}^{-|y'|^2}\langle y^{\dagger\prime}|X|y'\rangle \tag{2.7.39}$$

として計算される．$(y-y')|y'\rangle = 0$ であるから

$$\langle y\rangle_{q',p'} = y' \qquad すなわち \quad \langle q\rangle_{q',p'} = q' \quad および \quad \langle p\rangle_{q',p'} = p' \tag{2.7.40}$$

であり，そして

$$\left\langle (y-y')^2\right\rangle_{q',p'} = 0\,, \qquad \left\langle (y^\dagger - y^{\dagger\prime})^2\right\rangle_{q',p'} = 0\,,$$
$$\left\langle (y^\dagger - y^{\dagger\prime})(y-y')\right\rangle_{q',p'} = 0 \tag{2.7.41}$$

から，

$$(\delta q)^2 = (\delta p)^2 = \tfrac{1}{2} \qquad および \qquad \delta q\,\delta p = \tfrac{1}{2} \tag{2.7.42}$$

を得る．

2.3 節ですでに議論したように，y の固有ベクトルはすべて最小不確定性の状態である．関連性を調べるために以前の結果に戻ってみることにする．ここでは，$\delta q = \delta p\ (= 1/\sqrt{2})$ と簡単化した最小不確定性の状態を考えると

$$\gamma = \frac{\delta p}{\delta q} = 1: \qquad (p - \langle p\rangle)|\ \rangle = \mathrm{i}(q - \langle q\rangle)|\ \rangle \tag{2.7.43}$$

---

*Roy Jay Glauber (b. 1925)

が成り立ち，移項すると

$$\left[\frac{q+\mathrm{i}p}{\sqrt{2}}-\frac{\langle q\rangle+\mathrm{i}\,\langle p\rangle}{\sqrt{2}}\right]\big|\ \big\rangle=0 \tag{2.7.44}$$

となり，$q'=\langle q\rangle$, $p'=\langle p\rangle$ とおくと $(y-y')\big|\ \big\rangle=0$ と同じものであることがわかる．また，この状態の q' 表示の波動関数(式(2.3.6)を参照せよ)

$$\psi(q'')=\pi^{-\frac{1}{4}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'(q''-q')}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(q''-q')^2}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}q'p'} \tag{2.7.45}$$

と，コヒーレント状態の波動関数は

$$\begin{aligned}\big\langle q''\big|q',p'\big\rangle&=\big\langle q''\big|y'\big\rangle\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|y'|^2}\\&=\pi^{-\frac{1}{4}}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q''^2+\sqrt{2}q''y'-\frac{1}{2}y'^2-\frac{1}{2}|y'|^2}\\&=\pi^{-\frac{1}{4}}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q''^2+q''(q'+\mathrm{i}p')-\frac{1}{4}(q'+\mathrm{i}p')^2-\frac{1}{4}(q'^2+p'^2)}\\&=\pi^{-\frac{1}{4}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'(q''-q')}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}q'p'}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(q''-q')^2}\end{aligned} \tag{2.7.46}$$

より一致することがわかる．

ベクトル $\big|q',p'\big\rangle$ や $\big\langle q',p'\big|$ が与えられたとき，完全性や直交性を問うことは当然の成り行きである．そこでまず

$$\big\langle q''\big|q',p'\big\rangle\big\langle q',p'\big|q'''\big\rangle=\pi^{-\frac{1}{2}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'(q''-q''')}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(q''-q')^2}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(q'''-q')^2} \tag{2.7.47}$$

を考え，最初に p' で積分すると

$$\int\big\langle q''\big|q',p'\big\rangle\frac{\mathrm{d}p'}{2\pi}\big\langle q',p'\big|q'''\big\rangle=\pi^{-\frac{1}{2}}\delta(q''-q''')\,\mathrm{e}^{-(q''-q')^2} \tag{2.7.48}$$

となり，次に q' で積分すると

$$\int\big\langle q''\big|q',p'\big\rangle\frac{\mathrm{d}q'\mathrm{d}p'}{2\pi}\big\langle q',p'\big|q'''\big\rangle=\delta(q''-q''')=\big\langle q''\big|1\big|q'''\big\rangle \tag{2.7.49}$$

となる．これは完全性を表す1つの表現

$$1=\int\big|q',p'\big\rangle\frac{\mathrm{d}q'\mathrm{d}p'}{2\pi}\big\langle q',p'\big| \tag{2.7.50}$$

に対応する．実際，問題 2-29 で学ぶように，ベクトル $\big|q',p'\big\rangle$ には多くの完全性の表現が存在する．これはコヒーレント状態 $\big|q',p'\big\rangle$ が過剰な完全系を成すためである．

しかし，ここで

$$\begin{aligned}\big\langle q',p'\big|q'',p''\big\rangle&=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|y'|^2}\underbrace{\big\langle y^{\dagger\prime}\big|y''\big\rangle}_{=\exp(y^{\dagger\prime}y'')}\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|y''|^2}\\&=\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}(q'p''-p'q'')}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{4}(q'-q'')^2}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{4}(p'-p'')^2}\end{aligned} \tag{2.7.51}$$

を考えよう．この量は $(q',p')=(q'',p'')$ では 1 に等しいが，$(q',p')\neq(q'',p'')$ では 0 ではない．$|q'-q''|$ または $|p'-p''|$ が大きくなった場合にのみ小さくなる．しかしこれは当然である．状態 $\langle q',p'|$ は，q および p の測定値の平均値が q' および p' であり分散が $\delta q=\delta p=1/\sqrt{2}$ となる状態を記述している．このスケールに比べて小さな q' や p' の変化に対応する状態は，元とそんなに違った状態ではない．1 つもしくは両方のガウス関数が非常に小さな値になるほど変化が大きいときに，違った状態を作り出すのである．完全性の表現(2.7.50)は 1 つの状態をそれぞれの範囲 $\Delta q'$, $\Delta p'$ に近似的に結び付け，

$$\frac{\Delta q'\Delta p'}{2\pi}=1 \tag{2.7.52}$$

とできることを示唆している．範囲が $\Delta q'\Delta p'/2\pi\gg 1$ の中での確率を問う場合には，個々の状態を確定する必要はない．この意味で主張できることは，単位ベクトル $|\ \rangle$ に対して $\psi(q',p')=\langle q',p'|\ \rangle$ であることに注意すると

$$1=\int\frac{\mathrm{d}q'\mathrm{d}p'}{2\pi}|\psi(q',p')|^2 \tag{2.7.53}$$

となるから，最小不確定性の状態での q と p の測定において間隔 $\mathrm{d}q',\mathrm{d}p'$ の間に値 q',p' を与える確率は

$$\frac{\mathrm{d}q'\mathrm{d}p'}{2\pi}|\psi(q',p')|^2 \tag{2.7.54}$$

で与えられるということである．

2.8 古典的極限

まず，例として

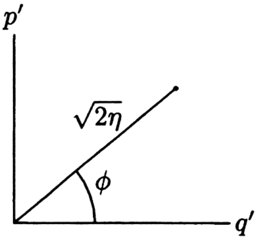
$$\psi_n(q',p')=\langle q',p'|n\rangle=\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|y'|^2}\underbrace{\langle y^{\dagger\prime}|n\rangle}_{=(y^{\dagger\prime})^n/\sqrt{n!}} \tag{2.8.1}$$

を考えよう．すると

$$|\psi_n(q',p')|^2=\frac{1}{n!}\left(\frac{q'^2+p'^2}{2}\right)^n\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(q'^2+p'^2)}=\frac{\eta^n}{n!}\mathrm{e}^{-\eta}$$
$$\text{ただし}\quad \eta=\frac{q'^2+p'^2}{2} \tag{2.8.2}$$

である．極座標を用いると

$$
\begin{aligned}
q' &= \sqrt{2\eta}\,\cos\phi\,,\\
p' &= \sqrt{2\eta}\,\sin\phi\,,\\
\frac{\mathrm{d}q'\mathrm{d}p'}{2\pi} &= \frac{\mathrm{d}\phi}{2\pi}\mathrm{d}\eta \to \mathrm{d}\eta\,,
\end{aligned}
\tag{2.8.3}
$$



となり，1つの量子状態は近似的に $\Delta\eta = 1$ に対応する（これについてはすぐ後にさらに言及する）．当然ながら

$$
\int \frac{\mathrm{d}q'\mathrm{d}p'}{2\pi}\left|\psi_n(q',p')\right|^2 = \int_0^\infty \mathrm{d}\eta\,\frac{\eta^n}{n!}\,\mathrm{e}^{-\eta} = 1 \tag{2.8.4}
$$

が成り立つ．さらに

$$
\sum_{n=0}^{\infty}\left|\psi_n(q',p')\right|^2 = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\eta^n}{n!}\,\mathrm{e}^{-\eta} = \mathrm{e}^{\eta}\,\mathrm{e}^{-\eta} = 1 \tag{2.8.5}
$$

も成り立つことにも注意しよう．この結果は予期できることであり，実際，$|nn|$ 観測記号の完全性とベクトル $|q',p'\rangle$ が規格化されていることを用いると

$$
\begin{aligned}
\sum_{n=0}^{\infty}\left|\psi_n(q',p')\right|^2 &= \sum_{n=0}^{\infty}\langle q',p'|n\rangle\langle n|q',p'\rangle\\
&= \langle q',p'|q',p'\rangle = 1
\end{aligned}
\tag{2.8.6}
$$

を得る．

与えられた n で $|\psi_n|^2$ が最大となる η を求めると，

$$
\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta}\log|\psi_n|^2 = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta}[n\log\eta - \eta] = \frac{n}{\eta} - 1 = 0 \tag{2.8.7}
$$

より $\eta = n$ となり，最大値は

$$
|\psi_n|^2_{\eta=n} = \frac{n^n}{n!}\,\mathrm{e}^{-n} \tag{2.8.8}
$$

である．大きな n に対するスターリング*の漸近展開

$$
n! \sim \sqrt{2\pi n}\,n^n\,\mathrm{e}^{-n}\left(1 + \frac{1}{12n} + \cdots\right) \tag{2.8.9}
$$

（この2項までの近似を用いた結果は，$1! \cong 0.9990$, $2! \cong 2\times 0.9995$, $3! \cong 6\times 0.9997$）を用いると，最大値に対して

$$
|\psi_n|^2 \cong \frac{1}{\sqrt{2\pi n}}\frac{1}{1+\frac{1}{12n}} \tag{2.8.10}
$$

---

*James STIRLING (1692–1770)

と近似できる．η および η^2 の平均値は

$$\langle\eta\rangle = \int_0^\infty \mathrm{d}\eta \, \frac{\eta^{n+1}}{n!} \, \mathrm{e}^{-\eta} = \frac{(n+1)!}{n!} = n+1 \, ,$$
$$\left\langle\eta^2\right\rangle = \int_0^\infty \mathrm{d}\eta \, \frac{\eta^{n+2}}{n!} \, \mathrm{e}^{-\eta} = \frac{(n+2)!}{n!} = (n+2)(n+1)$$
$$= \langle\eta\rangle^2 + \langle\eta\rangle \tag{2.8.11}$$

であるから，これより分散は

$$(\delta\eta)^2 = \left\langle(\eta - \langle\eta\rangle)^2\right\rangle = \left\langle\eta^2\right\rangle - \langle\eta\rangle^2 = \langle\eta\rangle \tag{2.8.12}$$

すなわち

$$\delta\eta = \sqrt{\langle\eta\rangle} \tag{2.8.13}$$

で与えられる．

そこで非常に大きな n では，η の**相対分散**は

$$\frac{\delta\eta}{\langle\eta\rangle} = \frac{1}{\sqrt{\langle\eta\rangle}} = \frac{1}{\sqrt{n+1}} \begin{cases} \cong 1/\sqrt{n} & (n \gg 1)\, , \\ \to 0 & (n \to \infty) \end{cases} \tag{2.8.14}$$

にしたがってゼロに近づく．確率密度がどのようになるかを調べるために，$\eta = n(1+\nu)$ とおいて漸近展開(2.8.9)の主要項を用いると

$$|\psi_n|^2 \cong \frac{\mathrm{e}^{n\log[n(1+\nu)] - n - n\nu}}{\sqrt{2\pi n}\, n^n \, \mathrm{e}^{-n}}$$
$$\cong \frac{1}{\sqrt{2\pi n}} \mathrm{e}^{n\log(1+\nu) - n\nu}$$
$$\cong \frac{\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}n\nu^2}}{\sqrt{2\pi n}} \tag{2.8.15}$$

となる．ここで，$|\nu| \ll 1$ では $\log(1+\nu) \cong \nu - \frac{1}{2}\nu^2$ となること，およびこの近似が首尾一貫するように考慮している．大きな n に対して

$$\int \mathrm{d}\eta |\psi_n|^2 \cong \int_{-\infty}^\infty \mathrm{d}\nu \sqrt{\frac{n}{2\pi}} \, \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}n\nu^2} = 1 \tag{2.8.16}$$

および

$$\lim_{n\to\infty} \sqrt{\frac{n}{2\pi}} \, \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}n\nu^2} = \begin{cases} \infty & (\nu = 0)\, , \\ 0 & (\nu \neq 0) \end{cases} \tag{2.8.17}$$

であるから，

$$\lim_{n\to\infty} \mathrm{d}\eta |\psi_n(q', p')|^2 = \mathrm{d}\nu \, \delta(\nu) \tag{2.8.18}$$

とデルタ関数で表される．$\eta = \frac{1}{2}(q'^2 + p'^2)$ が漸近的には n と厳密に対応するという

ことから，これを n の古典的極限と見なすことができる．このとき q と p の非可換性やこれと同値な不確定性 $\delta q \delta p = \frac{1}{2}$ は観測することはできない．

再び式(2.8.6)に戻り，η について 0 から $\overline{\eta}$ まで積分すると

$$\sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\overline{\eta}} \mathrm{d}\eta |\psi_n(q', p')|^2 = \overline{\eta} \tag{2.8.19}$$

となる．ここで，$\overline{\eta} \gg 1$ としよう．任意の $n \ll \overline{\eta}$ では積分範囲は実質的に全部の $|\psi_n|^2$ 分布に広がり，積分値は 1 となる．大きな n で $\overline{\eta}$ と同程度である場合は，近似的に

$$\mathrm{d}\eta |\psi_n|^2 \cong \mathrm{d}\nu\, \delta(\nu) = \mathrm{d}\eta\, \delta(\eta - n) \tag{2.8.20}$$

と表されるので，$n < \overline{\eta}$ に対しては大きさ 1 の寄与をし，$\overline{\eta}$ より大きな場合は寄与しない．この結果は，$n < \overline{\eta}$ となる状態数は漸近的には $\overline{\eta}$ で与えられることを示している．この意味で $\overline{\eta}$ が 1 増加する $(\Delta\eta = 1)$ ことは状態を 1 個加えることに対応する．

2.9　停留不確定性の状態に関する補足

これまでに，まず最初に $N = y^\dagger y$ のスペクトルが $n = 0, 1, 2 \ldots$ であることを見出し，次に固有ベクトルを作り上げた．この節では，固有値と(波動関数で表された)固有ベクトルを同時に与える方法を示そう．そのためにまず

$$\langle y^{\dagger\prime} |\, \mathrm{e}^{-\beta N} | y'' \rangle \qquad (\beta > 0) \tag{2.9.1}$$

を β で微分すると

$$-\frac{\partial}{\partial\beta} \langle y^{\dagger\prime} |\, \mathrm{e}^{-\beta N} | y'' \rangle = \langle y^{\dagger\prime} | y^\dagger y\, \mathrm{e}^{-\beta N} | y'' \rangle \tag{2.9.2}$$

となる．そこで(問題 2-32 を見よ)

$$y f(N) = f(N+1) y \tag{2.9.3}$$

を用いると

$$y\, \mathrm{e}^{-\beta N} = \mathrm{e}^{-\beta N}\, \mathrm{e}^{-\beta} y \tag{2.9.4}$$

となり，

$$\begin{aligned} \langle y^{\dagger\prime} | y^\dagger y\, \mathrm{e}^{-\beta N} | y'' \rangle &= \langle y^{\dagger\prime} | y^\dagger\, \mathrm{e}^{-\beta N}\, \mathrm{e}^{-\beta} y | y'' \rangle \\ &= y^{\dagger\prime}\, \mathrm{e}^{-\beta} y'' \langle y^{\dagger\prime} |\, \mathrm{e}^{-\beta N} | y'' \rangle \end{aligned} \tag{2.9.5}$$

を得る．したがって，微分方程式は $(\partial\beta \to \mathrm{d}\beta)$

$$\frac{\mathrm{d}\langle y^{\dagger\prime} |\, \mathrm{e}^{-\beta N} | y'' \rangle}{\langle y^{\dagger\prime} |\, \mathrm{e}^{-\beta N} | y'' \rangle} = -\mathrm{d}\beta\, y^{\dagger\prime}\, \mathrm{e}^{-\beta} y'' = \mathrm{d}[y^{\dagger\prime}\, \mathrm{e}^{-\beta} y''] \tag{2.9.6}$$

となるから，積分して

$$\langle y^{\dagger\prime}|\,\mathrm{e}^{-\beta N}|y''\rangle = \mathrm{e}^{y^{\dagger\prime}\mathrm{e}^{-\beta}y''} \tag{2.9.7}$$

を得る．ここで積分定数は

$$\langle y^{\dagger\prime}|\,\mathrm{e}^{-\beta N}|y''\rangle \to \langle y^{\dagger\prime}|y''\rangle = \mathrm{e}^{y^{\dagger\prime}y''} \qquad (\beta \to 0) \tag{2.9.8}$$

となるようにすでに選んでいる．

N の固有値（しばらくの間 N' と記す）と固有ベクトルを導入しその完全性を用いると，式(2.9.7)は

$$\sum_{N'}\langle y^{\dagger\prime}|N'\rangle\,\mathrm{e}^{-\beta N'}\langle N'|y''\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(y^{\dagger\prime})^n}{\sqrt{n!}}\,\mathrm{e}^{-\beta n}\frac{(y'')^n}{\sqrt{n!}} \tag{2.9.9}$$

と表され，この両辺を比較すると，固有値は

$$N' = n = 0, 1, \ldots \tag{2.9.10}$$

で波動関数は

$$\langle y^{\dagger\prime}|n\rangle = \frac{(y^{\dagger\prime})^n}{\sqrt{n!}}\,, \quad \langle n|y''\rangle = \frac{(y'')^n}{\sqrt{n!}} \tag{2.9.11}$$

であることを再確認できる．

問題

2-1 式(2.1.28)と(2.1.29)は

$$\lim_{P\to\infty}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\chi}{\pi}\,\frac{\sin\chi}{\chi}\psi(q'+\chi/P) = \psi(q')$$

であると述べている．これを次の関数

$$\psi(q') = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kq'}$$

を積分することで具体的に検証せよ．ただし k は正の定数とする．

2-2 任意の ϵ に対して，もし $K(\epsilon p')$ が式(2.1.31)にしたがうと仮定すると，式(2.1.30)の形の $\delta(q'-q'')$ は

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}q'\,\delta(q'-q'') = 1$$

を満たすことを示せ．例として $K(x) = 1/(1+x^2)$ に対して具体的に検証せよ．

2-3 次の積分

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p'}{2\pi}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}p'(q'-q'')}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}(\epsilon p')^2}$$

の計算を行い，これが $\epsilon \to 0$ の極限でデルタ関数の性質を持つことを確かめよ．

2-4　次の式

$$x\delta(x) = 0$$

を微分し，

$$x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\delta(x) = -\delta(x)$$

を証明せよ．$x^2(\mathrm{d}/\mathrm{d}x)^2\delta(x)$ に対しても類似の表現を求めよ．

2-5　同様に

$$f(x)\delta(x-a) = f(a)\delta(x-a)$$

から始めて

$$f(x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\delta(x-a) = f(a)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\delta(x-a) - \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(a)\delta(x-a)$$

を示せ．$f(x)(\mathrm{d}/\mathrm{d}x)^2\delta(x-a)$ に対しても対応する表現を求めよ．

2-6　式(1.14.45)すなわち

$$\mathrm{tr}\,\{f(U,V)\} = \frac{1}{\nu}\sum_{u',v'} f(u';v')$$

で，セミコロンは式(1.14.39)の UV 順序を示している．これより，

$$\mathrm{tr}\,\{f(q,p)\} = \int \frac{\mathrm{d}q'\,\mathrm{d}p'}{2\pi}\, f(q';p')$$

を示せ．

2-7a　規格化された行列要素

$$f_1(q',p') = \frac{\langle q'|f(q,p)|p'\rangle}{\langle q'|p'\rangle}\,, \qquad f_2(p',q') = \frac{\langle p'|f(q,p)|q'\rangle}{\langle p'|q'\rangle}$$

を考え，

$$f(q,p) = f_1(q;p) = f_2(p;q)$$

を示せ．与えられた $f_1(q',p')$ に対して $f_2(p',q')$ は何か？

2-7b　$f(q,p) = pq^2p$ の qp 順序の形を $[q,p] = \mathrm{i}$ を用いて求めよ．そして $f_1(q',p')$ を計算することにより求めよ．同様に pq 順序の形についても実行せよ．

2-8a　演算子

$$U(q',p') = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\frac{p'}{q'}q^2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}q'p}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\frac{p'}{q'}q^2}$$

を色々な方法で評価し，次の式が成り立つことをを示せ．

$$U(q',p') = \mathrm{e}^{\mathrm{i}(q'p - p'q)} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}q'p}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}p'q}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}q'p'} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}p'q}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}q'p}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}q'p'} .$$

2-8b 等式

$$\frac{1}{\nu}\mathrm{tr}\left\{\left(U^k V^l\right)^\dagger U^{k'} V^{l'}\right\} = \delta_{kk'}\delta_{ll'}$$

$$\text{ただし } k,l,k',l' = 0,\pm1,\pm2,\ldots,\pm\tfrac{1}{2}(\nu-1)$$

から出発して(問題 1-51 を参照せよ)次の式を導け．

$$\mathrm{tr}\left\{U(q',p')^\dagger U(q'',p'')\right\} = 2\pi\delta(q'-q'')\delta(p'-p'') .$$

2-8c 問題 2-6 を用いて

$$\mathrm{tr}\left\{U(q',p')\right\} = 2\pi\delta(q')\delta(p')$$

を証明せよ．これから問題 2-8b の結果を出すことができるか？

2-9a 等式

$$qU(q',p') + U(q',p')q = 2\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial p'}U(q',p')$$

を証明せよ．そして $pU + Up$ に対して同様な結果を求めよ．これらを用いて**鏡映演算子**

$$R = \int \frac{\mathrm{d}q'\,\mathrm{d}p'}{4\pi} U(q',p')$$

が次の関係を満たすことを示せ．

$$Rq = -qR , \qquad Rp = -pR .$$

2-9b R がエルミートでユニタリーであることを示せ．すると，R の固有値は何か？

2-9c 問題 2-7 を用いて R の qp 順序を求めよ．次に，これから直ちに pq 順序を得ることができるか？

2-10a $\mathrm{e}^{-\lambda B}A\,\mathrm{e}^{\lambda B}$ のテーラー級数展開を用いて

$$\mathrm{e}^{-B}A\,\mathrm{e}^{B} = A + \left[A,B\right] + \frac{1}{2!}\Big[\left[A,B\right],B\Big] + \cdots$$

を証明せよ．もし $\left[A,B\right]$ が B と交換するならば，どのように簡単化するかを調べよ．

2-10b　$[A,B]$ が A および B と交換するときに公式

$$\mathrm{e}^{A+B}=\mathrm{e}^{A}\,\mathrm{e}^{B}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}[A,B]}=\mathrm{e}^{B}\,\mathrm{e}^{A}\,\mathrm{e}^{\frac{1}{2}[A,B]}$$

が成り立つことが，問題 2-8a の結果に現れていることを確かめよ．

2-10c　前問の公式を

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\,\mathrm{e}^{\lambda(A+B)}=(A+B)\,\mathrm{e}^{\lambda(A+B)}$$

から出発し，$\mathrm{e}^{\lambda(A+B)}=\mathrm{e}^{\lambda B}X(\lambda)$ と書いて直接的に証明せよ．

2-11　$[A,B]$ が B と交換し $\big[[A,B],A\big]$ が A と交換する場合に問題 2-10b と問題 2-10c を拡張せよ．

2-12a　1.16 節と 2.1 節での対称的な $\nu\to\infty$ 極限の代案として，

$$\sum_m \langle u_k|v_m\rangle\langle v_m|u_l\rangle=\delta_{kl}$$

を再考し

$$\phi=\frac{2\pi k}{\nu}\,,\qquad \phi'=\frac{2\pi l}{\nu}\,,$$

$$\text{ただし}\quad k,l=0,\pm1,\pm2,\ldots,\pm\tfrac{1}{2}(\nu-1)$$

と定義する．すると，$\nu\to\infty$ の極限で次の式が成り立つことを示せ．

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty}\frac{1}{2\pi}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}m(\phi-\phi')}=\delta(\phi-\phi')\qquad(-\pi<\phi,\phi'<\pi)\,.$$

2-12b　ベクトル $\langle\phi|$ と $|m\rangle$ が

$$\langle\phi|m\rangle=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi m}$$

$$-\pi<\phi<\pi\qquad\text{そして}\qquad m=0,\pm1,\pm2,\ldots$$

であるとする．関係式

$$\int_{-\pi}^{\pi}\mathrm{d}\phi\,\langle m|\phi\rangle\langle\phi|m'\rangle=\delta_{m,m'}\,,$$

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty}\langle\phi|m\rangle\langle m|\phi'\rangle=\delta(\phi-\phi')$$

を証明せよ．なぜこれらはベクトルの組の直交性と完全性を表現しているか説明せよ．

2-12c エルミート演算子 Φ と M を

$$\Phi = \int_{-\pi}^{\pi} \mathrm{d}\phi \, |\phi\rangle\phi\langle\phi| \,, \qquad M = \sum_{m=-\infty}^{\infty} |m\rangle m\langle m|$$

と定義する．ユニタリー演算子 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}m'\Phi}$ と $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi' M}$ を用いて，式(1.14.28)および(1.14.33)の類似性を述べよ(ベクトル $\langle\phi|$ と $\langle\phi'|$ は，もし $\phi - \phi' = 2\pi$ ならば同一であるという規約を導入する必要があるだろう．なぜか？)．

2-13 不等式

$$\frac{1}{2}\sum_{a',a''} \left|\psi_1(a')\psi_2(a'') - \psi_2(a')\psi_1(a'')\right|^2 \geq 0$$

から出発して

$$\langle 1|1\rangle\langle 2|2\rangle \geq \left|\langle 1|2\rangle\right|^2$$

に到達せよ．等号が成り立つ条件も調べよ．

2-14 エルミート演算子 A と B はそれぞれ期待値 $\langle A\rangle$ と $\langle B\rangle$，および広がり δA と δB を持つとする．次に

$$X = \delta B\left(A - \langle A\rangle\right) + \mathrm{i}\,\delta A\left(B - \langle B\rangle\right)$$

と定義し，次の不等式

$$\left\langle X^\dagger X\right\rangle \geq 0 \,, \qquad \left\langle X X^\dagger\right\rangle \geq 0$$

を利用して(問題 1-27 を参照)

$$\delta A\, \delta B \geq \frac{1}{2}\left|\mathrm{i}\left[A, B\right]\right|$$

を証明せよ．等号が成り立つ条件も調べよ．これはロバートソン*によるハイゼンベルクの不確定性関係の一般形(1929)である．これを $(A,B) = (q,p)$ 対と $(A,B) = (\sigma_x, \sigma_y)$ 対に応用せよ．

2-15 エルミート演算子 A を規格化されたベクトル $|1\rangle$ に作用した結果 $A|1\rangle$ は一般的に

$$A|1\rangle = |1\rangle a + |2\rangle b$$

の形になる．ここで $|2\rangle$ は $|1\rangle$ と直交する規格化されたベクトルである．もし $|1\rangle$ が量子系の状態を表すならば，a と $|b|$ はそれぞれ A の期待値と広がりであることを示せ．もし A が非エルミートならば何が変わるか？

---

*Howard Percy ROBERTSON (1903–1961)

2-16　エルミート演算子 A に小さな数を掛けたものを指数関数化したユニタリー演算子 $\exp(\mathrm{i}\varepsilon A)$, $|\varepsilon| \ll 1$ は，単位記号1とほとんど違わない．ε の2次のオーダーまで期待値 $\left\langle \exp(\mathrm{i}\varepsilon A)\right\rangle$ を求め

$$\left|\left\langle \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varepsilon A}\right\rangle\right|^2 = 1 - \varepsilon^2\left(\delta A\right)^2 + O\left(\varepsilon^4\right)$$

であることを証明せよ．これを問題1-10の状況に応用せよ．

2-17a　2.4節では"許される簡単化"$\langle q\rangle = \langle p\rangle = 0$ および $\delta q = \delta p$ を行った．これを正当化するために，一般の状況を考える．期待値 $\langle q\rangle$, $\langle p\rangle$ および

$$\begin{aligned}\left\langle q^2\right\rangle &= \langle q\rangle^2 + (\delta q)^2\,,\\ \left\langle p^2\right\rangle &= \langle p\rangle^2 + (\delta p)^2\,,\\ \left\langle \tfrac{1}{2}(qp+pq)\right\rangle &= \langle q\rangle\langle p\rangle + \Delta\end{aligned}$$

が，次の制限条件(なぜか？)

$$(\delta q\,\delta p)^2 \geq \tfrac{1}{4} + \Delta^2$$

を満たす以外は任意であるとする．そこで，3個続いた線形変換

$$\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} \overline{q} \\ \overline{p} \end{pmatrix} = U_1^{-1}\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}U_1 = \begin{pmatrix} q-\langle q\rangle \\ p-\langle p\rangle \end{pmatrix}\,,$$

$$\begin{pmatrix} \overline{q} \\ \overline{p} \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} \overline{\overline{q}} \\ \overline{\overline{p}} \end{pmatrix} = U_2^{-1}\begin{pmatrix} \overline{q} \\ \overline{p} \end{pmatrix}U_2 = \begin{pmatrix} \cos\phi & \sin\phi \\ -\sin\phi & \cos\phi \end{pmatrix}\begin{pmatrix} \overline{q} \\ \overline{p} \end{pmatrix}\,,$$

$$\begin{pmatrix} \overline{\overline{q}} \\ \overline{\overline{p}} \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} Q \\ P \end{pmatrix} = U_3^{-1}\begin{pmatrix} \overline{\overline{q}} \\ \overline{\overline{p}} \end{pmatrix}U_3 = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{-\kappa}\,\overline{\overline{q}} \\ \mathrm{e}^{\kappa}\,\overline{\overline{p}} \end{pmatrix}$$

は，

$$\langle Q\rangle = 0\,,\quad \langle P\rangle = 0\,,\qquad \left\langle Q^2\right\rangle = \left\langle P^2\right\rangle\,,$$
$$\left\langle \tfrac{1}{2}(QP+PQ)\right\rangle = 0$$

となるように選ばれるとする．まず各変換は基本的な交換関係

$$\left[\overline{q},\overline{p}\right] = \left[\overline{\overline{q}},\overline{\overline{p}}\right] = \left[Q,P\right] = \left[q,p\right] = \mathrm{i}$$

を保存することを確かめよ．次に上記の構築により

$$\langle\,\overline{q}\,\rangle = 0\,,\quad \langle\,\overline{p}\,\rangle = 0$$

であり，したがって

$$\left\langle\overline{\overline{q}}\right\rangle = 0\,,\quad \left\langle\overline{\overline{p}}\right\rangle = 0\,,\qquad \langle Q\rangle = 0\,,\quad \langle P\rangle = 0$$

であることを注意せよ．次に

$$\left\langle \tfrac{1}{2}(\overline{q}\,\overline{p}+\overline{p}\,\overline{q})\right\rangle = 0$$

となるように角度 ϕ を決定せよ．最後に $\langle Q^2\rangle = \langle P^2\rangle$ となるように κ の値を決定せよ．このようにして，簡単化 $\langle q\rangle = 0$ $\langle p\rangle = 0$, $\langle q^2\rangle = \langle p^2\rangle$, および $\langle (qp+pq)\rangle = 0$ を正当化することができるか？

2-17b　ϕ, κ, そして $\epsilon \equiv 2\langle Q^2\rangle = 2\langle P^2\rangle \geq 1$ を用いて $(\delta q)^2$, $(\delta p)^2$, および Δ を表せ．$(\delta q\,\delta p)^2 - \Delta^2$ に対して何を得るか？ 結論は？

2-17c　ユニタリー演算子 U_1, U_2, U_3 は

$$\begin{aligned} U_1(q,p) &= e^{i(p\langle q\rangle - q\langle p\rangle)}\,, \\ U_2(\overline{q},\overline{p}) &= e^{-i\phi(\overline{q}^2+\overline{p}^2)/2}\,, \\ U_3(\overline{\overline{q}},\overline{\overline{p}}) &= e^{i\kappa(\overline{\overline{q}}\,\overline{\overline{p}}+\overline{\overline{p}}\,\overline{\overline{q}})/2} \end{aligned}$$

で与えられることを確かめよ．次に具体的な計算と一般的な議論から

$$U_1(q,p) = U_1(\overline{q},\overline{p})\,,\quad U_2(\overline{q},\overline{p}) = U_2(\overline{\overline{q}},\overline{\overline{p}})\,,\quad U_3(\overline{\overline{q}},\overline{\overline{p}}) = U_3(Q,P)$$

であることを示せ．

2-17d　全変換

$$\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} \to \begin{pmatrix} Q \\ P \end{pmatrix} = U^{-1}\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} U$$

は，3 個のユニタリー演算子の積

$$U = U_1(q,p)U_2(\overline{q},\overline{p})U_3(\overline{\overline{q}},\overline{\overline{p}})$$

で表される．U_k の具体的な形を用いることなく

$$U = U_3(q,p)U_2(q,p)U_1(q,p)$$

であることを証明せよ．これは U を元の変数 q と p を用いて表している．U を最終の変数 Q と P の関数として書くことができるか？

2-17e　もし 2 番目の変換を行わない $(\phi = 0)$ とすると，どのような値の κ ならば $\langle Q^2\rangle = \langle P^2\rangle$ が保証されるか？ この $\phi = 0$ の場合が簡単化 $\langle q\rangle = 0$, $\langle p\rangle = 0$, $\delta q = \delta p$ を正当化するに十分であることを論証せよ．

2-18　$A = y^\dagger y$ および $B = \alpha y^\dagger + \alpha^* y$（$\alpha$ は任意の複素数）に対して，問題 1-23 の和則を確かめよ．

2-19a　定義 (2.5.4) を用いて，エルミートの多項式の母関数

$$\mathrm{e}^{2tq - t^2} = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{t^n}{n!} \mathrm{H}_n(q)$$

を導き，式 (2.7.35) と比較せよ．

2-19b　この母関数から直接に式 (2.5.8)，(2.5.10)，および (2.5.12) を導け．

2-19c　母関数を使って，次の直交関係を証明せよ．

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}q \; \mathrm{e}^{-q^2} \mathrm{H}_n(q) \mathrm{H}_m(q) = \delta_{nm} \sqrt{\pi}\, 2^n n! \,.$$

2-20　2項展開 (2.6.3) を並べ換えて

$$N\big|00\big| = 0$$

を証明せよ．同様に次の式を証明せよ．

$$(N - n)\big|nn\big| = 0\,.$$

2-21　演算子 y と $y^\dagger$ について問題 1-54 と類似の関係は何か．それと $\big|00\big| = \exp(-y^\dagger; y)$ を組み合わせて，

$$y\big|00\big| = 0\,, \qquad \big|00\big|y^\dagger = 0$$

を証明せよ．さらに次の式を示せ．

$$\big|00\big|\,\big|00\big| = \big|00\big|\,.$$

2-22a　等式

$$\mathrm{e}^{-\lambda y^\dagger; y} = (1 - \lambda)^N\,, \qquad N = y^\dagger y$$

を証明せよ．$\lambda \to 1$ では，これは $\big|00\big|$ の表現である．ここで

$$\lambda = 1 - \mathrm{e}^{-\beta}$$

とおくと

$$\mathrm{e}^{-\beta N} = \mathrm{e}^{-\left(1 - \mathrm{e}^{-\beta}\right) y^\dagger; y}$$

を得る．この恒等式を用いて N の固有値と固有ベクトルを決定せよ．

2-22b この関係の解釈を $\beta \ll 1$ と $\beta \to \infty$ の場合に論ぜよ．

2-23 $N = y^\dagger y$ の固有値と固有ベクトルを見出すための別の方法もある．最初に任意のベクトル $|\ \rangle$ に対して，波動関数 $\psi(y^{\dagger\prime}) = \langle y^{\dagger\prime}|\ \rangle$ は $y^{\dagger\prime}$ の整関数であること，すなわち複素 $y^{\dagger\prime}$ 平面の至る所で解析的であることを示せ．次にこの大局的な解析性を用いて N の固有値と固有ベクトルを求めよ（ディラックは $\psi(y^{\dagger\prime})$ をベクトル $|\ \rangle$ のフォック*表現と呼んだ．しかし現在の用語では，確率振幅 $\psi_n = \langle n|\ \rangle$ の集合がフォック表現を構成し，不確定性停留状態 $|n\rangle$ は普通はフォック状態と呼ばれている）．

2-24 等式

$$y\,\mathrm{e}^{-\lambda y^\dagger;y} = \mathrm{e}^{-\lambda y^\dagger;y}(1-\lambda)y$$

を証明し，そのエルミート共役を求めよ．次に

$$R = \mathrm{e}^{-2y^\dagger;y} = (-1)^{y^\dagger y}$$

が問題 2-9 の鏡映演算子であることを証明せよ．

2-25 $y^k y^{\dagger k}$（$k = 1, 2, \ldots$）を N の多項式として表せ．それらを用いて，$|\lambda| < 1$ に対して

$$\mathrm{e}^{\lambda y;y^\dagger} = (1-\lambda)^{-N-1}$$

を証明せよ．問題 2-22a の λ を $-\lambda/(1-\lambda)$ で置き換えて，

$$\mathrm{e}^{\lambda y;y^\dagger} = \frac{1}{1-\lambda}\,\mathrm{e}^{\frac{\lambda}{1-\lambda}y^\dagger;y}$$

であることを示せ．両辺を $|0\rangle$ に作用すると同じ結果を与えることを確かめよ．

2-26 問題 2-25 の等価な順序付けられた演算子 Y は

$$yY = Y\frac{y}{1-\lambda}, \qquad Yy^\dagger = \frac{y^\dagger}{1-\lambda}Y$$

を満たすことを，$y^\dagger$ と y で微分することで示せ．これより，問題 2-25 を一般化して次の 2 つの式が成り立つことを示せ．

$$f(y)\,\mathrm{e}^{\lambda y;y^\dagger} = \frac{1}{1-\lambda}\,\mathrm{e}^{\frac{\lambda}{1-\lambda}y^\dagger;y} f\left(\frac{y}{1-\lambda}\right),$$

$$\mathrm{e}^{\lambda y;y^\dagger} f(y^\dagger) = \frac{1}{1-\lambda} f\left(\frac{y^\dagger}{1-\lambda}\right)\mathrm{e}^{\frac{\lambda}{1-\lambda}y^\dagger;y}.$$

2-27a 問題 1-43 の演算子 W が連続極限で対応する量は

$$W = \int \mathrm{d}x\,|q' = x\rangle\langle p' = x|$$

---

*Vladimir Alexandrovich FOCK (1898–1974)

である．$W|p'\rangle$, $W|q'\rangle$ を求め，問題 1-43c での W に対する様々な表現に対応する関係を求めよ．

2-27b　次の式が成り立つことをを示せ．

$$Wy = \mathrm{i}yW\,, \qquad y^\dagger W = W\mathrm{i}y^\dagger\,.$$

これらの式を用いて W を $y^\dagger$ と y の関数として表せ．

2-28a　演算子

$$\gamma = \tfrac{1}{2}(\sigma_x + \mathrm{i}\sigma_y)y + y^\dagger \tfrac{1}{2}(\sigma_x - \mathrm{i}\sigma_y)$$

は $y, y^\dagger$ と非エルミートなパウリ演算子 $\frac{1}{2}(\sigma_x \pm \mathrm{i}\sigma_y)$ との結合である．これがエルミートであることを示せ．この γ の固有値を求めよ（ヒント：γ^2 は何か？）．次に γ の固有ベクトルを，$y^\dagger y$ と σ_z の共通の固有ベクトル $|n, \pm\rangle$ を用いて表せ．

2-28b　$\gamma = \frac{1}{2}(\sigma_x + \mathrm{i}\sigma_y)y + y^\dagger \frac{1}{2}(\sigma_x - \mathrm{i}\sigma_y) + \epsilon\sigma_z$ について前問と同じ質問に答えよ．

2-29　式(2.7.38)のコヒーレント状態に対して等式

$$\int \frac{\mathrm{d}q'\,\mathrm{d}p'}{4\pi}|q', 0\rangle\, \mathrm{e}^{\frac{1}{4}(q'^2 + 2\mathrm{i}q'p' + p'^2)}\langle 0, p'| = 1$$

が成り立つことを証明せよ．これよりベクトル $|q', p' = 0\rangle$ がそれだけで完全であること，そしてベクトル $|q' = 0, p'\rangle$ もそれだけで完全であることはどのように示されるか？ コヒーレント状態の完全性を表す別の表現を見出すことができるか？

2-30　式(2.9.7)と完全性を表す式(2.7.50)を用いて

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}\left\{\mathrm{e}^{-\beta N}\right\} &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}q'\,\mathrm{d}p'}{2\pi}\,\mathrm{e}^{-|y'|^2}\langle y^{\dagger\prime}|\,\mathrm{e}^{-\beta N}|y'\rangle\Big|_{y^{\dagger\prime} = y'^*} \\ &= \frac{1}{1 - \mathrm{e}^{-\beta}}\end{aligned}$$

を示せ．この結果は N のスペクトルから期待できるか？ 問題 2-29 の完全性関係を用いて別の導出方法を求めよ．

2-31　問題 2-30 の結果を用いて

$$\langle N\rangle_\beta = \mathrm{tr}\{NP\} \qquad ただし \quad P = \frac{\mathrm{e}^{-\beta N}}{\mathrm{tr}\left\{\mathrm{e}^{-\beta N}\right\}}$$

を計算せよ．この P は確率演算子に対して課せられる一般的条件にしたがっているか？（問題 1-30 を参照）．

2-32 $|nn|$ の測定記号の完全性を利用することで，$yf(N) = f(N+1)y$ および $f(N)y^\dagger = y^\dagger f(N+1)$ を証明せよ．

2-33 $\mathrm{tr}\,\{\mathrm{e}^{-\beta N}\}$ の計算をするために，これを β で微分し次に問題 2-32 の結果を適用し，トレースの巡回的性質を用いて計算を実行せよ．ここで $\beta \to \infty$ での境界条件を必要とするであろう．最終的な結果は問題 2-30 の結果と一致するか？

2-34 異なる自由度を 1 と 2 とし，$N = y_1^\dagger y_1 + y_2^\dagger y_2$ とする．問題 2-30 の結果を用いて

$$\mathrm{tr}\left\{\mathrm{e}^{-\beta N}\right\}$$

を求めよ．得た結果からこの N の固有値と多重度を求めよ．初歩的な議論でこの結果を検証せよ．ν 自由度の

$$N = \sum_{k=1}^{\nu} y_k^\dagger y_k$$

に対しても上記の問題に対応する答えを求めよ．

2-35 トレースの巡回的な性質の観点から（問題 1-24 と 1-46 を参照），等式

$$\mathrm{tr}\left\{yy^\dagger\right\} - \mathrm{tr}\left\{y^\dagger y\right\} = 0$$

は正しいか？ 特に両方の項の具体的な数値的表現を与えよ．次に $\lambda > 0$ として，

$$\mathrm{tr}\left\{y\,\mathrm{e}^{-\lambda y^\dagger y}y^\dagger\right\} - \mathrm{tr}\left\{y^\dagger y\,\mathrm{e}^{-\lambda y^\dagger y}\right\}$$

での両方の項の具体的数値表現と比較せよ．この式はゼロか？ 教訓は何か？

2-36 これまで，なぜ

$$y^\dagger|\ \rangle = 0$$

にしたがうベクトルについて考えなかったか？ 左から y を掛けることによって，そしてベクトルを表す波動関数を作るために q' 表示を用いることによってこの問に答えよ．とにかくある意味で $|y^{\dagger\prime}\rangle$ および $\langle y'|$ は定義できる．ここで積分

$$|y'| > 0: \qquad \langle y'| = \int_0^\infty \mathrm{d}y^{\dagger\prime\prime}\ \mathrm{e}^{-y^{\dagger\prime\prime}y'}\langle y^{\dagger\prime\prime}|$$

において，積分が収束するように ∞ へ延びた積分経路を持ったものを考える．すると

$$\begin{aligned}\langle y'|(y-y') &= \int_0^\infty \mathrm{d}y^{\dagger\prime\prime}\,\frac{\partial}{\partial y^{\dagger\prime\prime}}\left[\mathrm{e}^{-y^{\dagger\prime\prime}y'}\langle y^{\dagger\prime\prime}|\right] \\ &= -\langle y^{\dagger\prime\prime} = 0|\end{aligned}$$

はゼロではなく，ある定数ベクトルであることを確かめよ．そこで

$$\langle y'| = \langle 0|\frac{1}{y'-y}\ , \qquad \langle y'|y''\rangle = \frac{1}{y'-y''}$$

とする．矛盾が無いことを検証するために，

$$\langle y'|y|y''\rangle = \langle y'|y''\rangle y'' = \frac{y''}{y'-y''}$$

と

$$\begin{aligned}\langle y'|y|y''\rangle &= y'\langle y'|y''\rangle - \langle 0|y''\rangle \\ &= \frac{y'}{y'-y''} - 1 = \frac{y''}{y'-y''}\end{aligned}$$

を比較せよ．また

$$-\frac{\partial}{\partial y'}\langle y'| = \langle y'|y^\dagger$$

を証明し，これより

$$\frac{(-\partial/\partial y')^n}{\sqrt{n!}}\underbrace{\langle y'|0\rangle}_{=1/y'} = \langle y'|\frac{(y^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle = \langle y'|n\rangle$$

を示し，さらに

$$\langle y'|n\rangle = \frac{\sqrt{n!}}{(y')^{n+1}}\ ; \qquad \langle n|y''\rangle = \frac{(y'')^n}{\sqrt{n!}}$$

を得よ．次に $|y'| > |y''|$ に対して

$$\begin{aligned}\langle y'|y''\rangle &= \sum_{n=0}^{\infty}\langle y'|n\rangle\langle n|y''\rangle = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{(y'')^n}{(y')^{n+1}} \\ &= \frac{1}{y'-y''}\end{aligned}$$

を示せ．

第 3 章

角運動量

3.1 無限小ユニタリー変換

物理的性質またはそれらの組み合わせは，演算子 $X, Y, \ldots$ によって記号的に表され，演算子は代数的関係 $X+Y=Z$, $XY=Z$ にしたがう．また状態はベクトル $\langle\ |$, $|\ \rangle$ によって記述され，代数的関係式 $X|1\rangle=|2\rangle$, $|1\rangle+|2\rangle=|3\rangle$ などにしたがう．そしてこれらは以下のようなエルミート共役な関係にしたがっている．たとえばエルミート演算子は $A^\dagger=A$ であり，状態は $\langle 1|X^\dagger=\langle 2|$ などの関係がある．ベクトルや演算子によって作られる数としては $\langle 1|2\rangle, \langle 1|X|2\rangle$, またはトレース $\mathrm{tr}\,\{X|2\rangle\langle 1|\}$ などがある．ここですべてのベクトルと演算子を $U^\dagger=U^{-1}$ となるユニタリー演算子を使って

$$\overline{\langle\ |}=\langle\ |U\,,\quad \overline{|\ \rangle}=U^{-1}|\ \rangle\,,\quad \overline{X}=U^{-1}XU \tag{3.1.1}$$

のように体系的に再定義したとすると，すべての代数的関係式，エルミート共役関係，および数値関係は次の式

$$\left.\begin{aligned} X+Y&=Z\\ XY&=Z\\ |1\rangle+|2\rangle&=|3\rangle\\ X|1\rangle&=|2\rangle\\ A^\dagger&=A \end{aligned}\right\}\rightarrow\left\{\begin{aligned} &\overline{X}+\overline{Y}=\overline{Z}\\ &\overline{X}\,\overline{Y}=\overline{Z}\\ &\overline{|1\rangle}+\overline{|2\rangle}=\overline{|3\rangle}\\ &\overline{X}\,\overline{|1\rangle}=\overline{|2\rangle}\\ &\overline{A}^\dagger=\overline{A} \end{aligned}\right. \tag{3.1.2}$$

および次の式のように保たれる．

$$\overline{\langle\ |}^\dagger=\overline{|\ \rangle}\,,\quad \langle 1|2\rangle=\overline{\langle 1|2\rangle}=\overline{\langle 1|}\times\overline{|2\rangle}\,,\quad \langle 1|X|2\rangle=\overline{\langle 1|}\,\overline{X}\,\overline{|2\rangle}\,. \tag{3.1.3}$$

このように，原子的現象の記号的および数値的な表現は，座標系の取り方に自由度があるように，ユニタリー変換に対する自由度を持っている．実際，これら 2 つの任意性は関連している．新しい座標系を導入することによる記述の変化はユニタリー変

換で表される．

$U=1$ は恒等変換である．以下のような恒等変換から無限小だけ異なる変換について考えよう．

$$U = 1 + \mathrm{i}G\ . \tag{3.1.4}$$

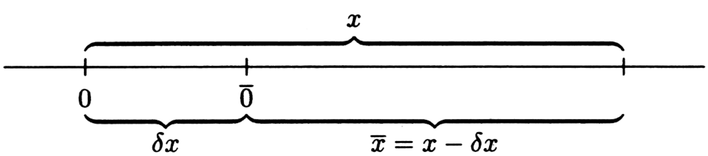
ここで G は大きさが ϵ のオーダーの無限小演算子であり，

$$\begin{aligned} U^\dagger &= 1 - \mathrm{i}G^\dagger\ , \\ U^\dagger U &= (1-\mathrm{i}G^\dagger)(1+\mathrm{i}G) = 1 + \mathrm{i}(G - G^\dagger) + G^\dagger G \end{aligned} \tag{3.1.5}$$

となるが，積 $G^\dagger G$ は2次の微小量で $\propto \epsilon^2$ なので無視する．したがって，**生成演算子** G はエルミート演算子となる．

$$G^\dagger = G\ . \tag{3.1.6}$$

今後，次のような座標の変換に類似した記法を使うことにしよう．



ここでは座標の原点を δx だけずらせると，座標 x は $x - \delta x$ となる．これを以下のように書くと

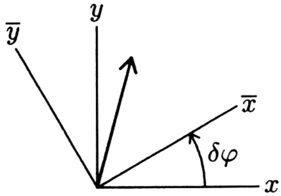
$$\begin{aligned} &|\ \rangle - \delta|\ \rangle = \overline{|\ \rangle} = U^{-1}|\ \rangle = (1-\mathrm{i}G)|\ \rangle\ , \\ &\langle\ | - \delta\langle\ | = \overline{\langle\ |} = \langle\ |U = \langle\ |(1+\mathrm{i}G)\ , \\ &X - \delta X = \overline{X} = U^{-1}XU = (1-\mathrm{i}G)X(1+\mathrm{i}G) = X - \frac{1}{\mathrm{i}}(XG - GX) \end{aligned} \tag{3.1.7}$$

次の式を得る．

$$\delta|\ \rangle = \mathrm{i}G|\ \rangle\ , \qquad \delta\langle\ | = -\langle\ |\mathrm{i}G\ , \qquad \delta X = \frac{1}{\mathrm{i}}[X, G]\ . \tag{3.1.8}$$

3.2　無限小回転

まず，z 軸の周りの微小角度 $\delta\varphi$ という，座標系の無限小回転について考えよう．



この回転で任意のベクトル $\boldsymbol{V}$ の各成分は

$$\begin{aligned}\overline{V}_x &= V_x + \delta\varphi V_y\ ,\\ \overline{V}_y &= V_y - \delta\varphi V_x\ ,\\ \overline{V}_z &= V_z\end{aligned} \tag{3.2.1}$$

と変換されるので，まとめると

$$\overline{\boldsymbol{V}} = \boldsymbol{V} - \delta\boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{V} \tag{3.2.2}$$

と書ける．ただし $\delta\boldsymbol{\omega}$ は $\delta\varphi$ と z 方向の単位ベクトルの積である．したがって変化は以下のようになる．

$$\delta\boldsymbol{V} = \delta\boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{V}\ . \tag{3.2.3}$$

G が無限小であることは明らかに $\delta\varphi$ で示される．そこで無限小回転の生成演算子を以下のように書こう．

$$G = \delta\varphi J_z = \delta\boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{J}\ . \tag{3.2.4}$$

ここでベクトル $\boldsymbol{J}$ を何と呼ぼうか？ 角運動量はどうだろうか？ この古典力学での専門用語（借用するのは用語だけだが）が適切であることは後で明らかになるであろう．

すでに以下の関係式が要請されることは学んだ．

$$\delta\boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{V} = \frac{1}{\mathrm{i}}[\boldsymbol{V}, \delta\boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{J}]\ . \tag{3.2.5}$$

これが演算子 $\boldsymbol{J}$ と任意のベクトルの成分とを関係付ける交換関係である．この関係を表す 1 つの方法として，ある数値ベクトル $\boldsymbol{a}$ を掛けて，$\delta\boldsymbol{\omega} \to \boldsymbol{b}$ とすると，以下の式を得る．

$$\frac{1}{\mathrm{i}}[\boldsymbol{a} \cdot \boldsymbol{V}, \boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{J}] = \boldsymbol{a} \times \boldsymbol{b} \cdot \boldsymbol{V}\ . \tag{3.2.6}$$

これより，$\boldsymbol{V}$ と $\boldsymbol{J}$ の平行な成分は

$$[V_k, J_k] = 0 \tag{3.2.7}$$

となり，交換することがわかる．さらに互いに垂直な成分の交換関係は，それらと垂直な第 3 の方向の $\boldsymbol{V}$ の成分に比例して

$$\frac{1}{\mathrm{i}}[V_j, J_k] = \begin{cases} +V_l & jkl \text{ が } xyz \text{ の偶置換} \\ -V_l & jkl \text{ が } xyz \text{ の奇置換} \end{cases} \tag{3.2.8}$$

となり，たとえば次のようになる．

$$\frac{1}{\mathrm{i}}[V_x, J_y] = V_z\ , \qquad \frac{1}{\mathrm{i}}[V_y, J_x] = -V_z\ . \tag{3.2.9}$$

この関係はベクトル $\boldsymbol{J}$ に対しても成立しなければならない．

$$\frac{1}{\mathrm{i}}[\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{J}, \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{J}] = \boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{J}\ . \tag{3.2.10}$$

したがって，たとえば

$$J_x J_y - J_y J_x = \mathrm{i} J_z \tag{3.2.11}$$

のような関係式が得られ，一般的には次のように書ける．

$$\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J} = \mathrm{i}\boldsymbol{J}\ . \tag{3.2.12}$$

問題 1-36a の解，

$$[\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{\sigma}, \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{\sigma}] = 2\mathrm{i}\boldsymbol{a}\times\boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{\sigma} \tag{3.2.13}$$

より，角運動量ベクトル $\boldsymbol{J}$ の 1 つの例として以下のようなものがある．

$$\boldsymbol{J} = \tfrac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}. \tag{3.2.14}$$

ベクトルで話を始めたが，より簡単なものとしてスカラー S がある．スカラーは回転で不変である．つまり $\delta S = 0$ だから以下のようになる．

$$0 = \frac{1}{\mathrm{i}}[S, \delta\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{J}] \qquad \text{または} \quad [S, \boldsymbol{J}] = 0\ . \tag{3.2.15}$$

2 つのベクトルの内積はスカラーである．この特性は矛盾しないのだろうか？ つまり以下の変化はどうなるのだろうか？

$$\delta(\boldsymbol{V_1}\cdot\boldsymbol{V_2}) = \delta\boldsymbol{V_1}\cdot\boldsymbol{V_2} + \boldsymbol{V_1}\cdot\delta\boldsymbol{V_2}\ . \tag{3.2.16}$$

これは次のようにしてゼロとなることがわかる．

$$\delta\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{V_1}\cdot\boldsymbol{V_2} + \underbrace{\boldsymbol{V_1}\cdot\delta\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{V_2}}_{=\boldsymbol{V_1}\times\delta\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{V_2}} = 0\ . \tag{3.2.17}$$

より一般的には，以下の式が成立する．

$$[XY, Z] = X[Y, Z] + [X, Z]Y\ . \tag{3.2.18}$$

問題 1-21a を参照．

3.3 $\boldsymbol{J}^2$ と J_z の同時固有ベクトル

角運動量ベクトルの 2 乗 $\boldsymbol{J}^2$ はスカラーであるから

$$[\boldsymbol{J}^2, \boldsymbol{J}] = 0 \tag{3.3.1}$$

となる．これより $\boldsymbol{J}^2$ と J_z は交換する．つまりこれらは両立できる物理量である．しかし J_x や J_y は，$\boldsymbol{J}^2$ とは交換するが J_z と交換しないので，含めることはできない．さて以上より $\boldsymbol{J}^2$ と J_z の固有ベクトルを求めよう．

$$\boldsymbol{J}^2 \big|\boldsymbol{J}^{2'}, J_z'\big\rangle = \big|\boldsymbol{J}^{2'}, J_z'\big\rangle \boldsymbol{J}^{2'} , \quad J_z \big|\boldsymbol{J}^{2'}, J_z'\big\rangle = \big|\boldsymbol{J}^{2'}, J_z'\big\rangle J_z' . \tag{3.3.2}$$

ここで次のような非エルミート演算子（しばしば**昇降演算子**と呼ばれる）

$$J_+ = J_x + \mathrm{i}J_y , \quad J_- = J_x - \mathrm{i}J_y = J_+^\dagger \tag{3.3.3}$$

を導入すると便利であり，交換関係は

$$\begin{aligned} [J_z, J_+] &= \mathrm{i}J_y + J_x = J_+ , \\ [J_z, J_-] &= \mathrm{i}J_y - J_x = -J_- \end{aligned} \tag{3.3.4}$$

となる．そして積は

$$\begin{aligned} J_+J_- &= (J_x + \mathrm{i}J_y)(J_x - \mathrm{i}J_y) = J_x^2 + J_y^2 - \mathrm{i}[J_x, J_y] \\ &= \boldsymbol{J}^2 - J_z^2 + J_z , \\ J_-J_+ &= (J_x - \mathrm{i}J_y)(J_x + \mathrm{i}J_y) = J_x^2 + J_y^2 + \mathrm{i}[J_x, J_y] \\ &= \boldsymbol{J}^2 - J_z^2 - J_z \end{aligned} \tag{3.3.5}$$

となり，それらの交換関係は次のようになる．

$$[J_+, J_-] = 2J_z . \tag{3.3.6}$$

簡単のために固有値を $J_z' = m$ と書き，すぐに理由は明らかになるのだが，慣習により $\boldsymbol{J}^{2'} = j(j+1)\,(\,j \geq 0)$ と書くことにしよう．すると次の式

$$J_zJ_+ - J_+J_z = J_+ \qquad \text{または} \qquad J_zJ_+ = J_+(J_z + 1) \tag{3.3.7}$$

より以下の結果を得る．

$$J_zJ_+\big|j,m\big\rangle = J_+(J_z+1)\big|j,m\big\rangle = J_+\big|j,m\big\rangle(m+1) . \tag{3.3.8}$$

さてここで $\boldsymbol{J}^2$ は $\boldsymbol{J}$ と交換するから，J_+ と交換し，

$$\boldsymbol{J}^2J_+\big|j,m\big\rangle = J_+\boldsymbol{J}^2\big|j,m\big\rangle = J_+\big|j,m\big\rangle j(j+1) \tag{3.3.9}$$

となるから，以下の結果を得る．

$$J_+\big|j,m\big\rangle = \big|j,m+1\big\rangle A_{jm} \,. \tag{3.3.10}$$

ここで A_{jm} は比例定数である．つまり，もし j,m が固有値ならば，一般に $j,m+1$ も固有値である．しかし m をずっと増加させることはできない．なぜなら以下の関係に注意すると $m(m+1)$ は $j(j+1)$ を超えることはできないからである．

$$\big\langle j,m\big|J_-J_+\big|j,m\big\rangle = \begin{cases} \Big(J_+\big|j,m\big\rangle\Big)^\dagger\Big(J_+\big|j,m\big\rangle\Big) \geq 0 \,, \\ j(j+1) - m(m+1) \,. \end{cases} \tag{3.3.11}$$

実際 m の最大値を $\overline{m}$ とすると $J_+\big|j,\overline{m}\big\rangle = 0$ の条件より次のようになる．

$$\overline{m} = j \,. \tag{3.3.12}$$

したがって，もう 1 個の根 $-j-1$ は負で $\overline{m}$ ではない．また上記の関係式より，比例定数は以下のようになることもわかる．

$$j(j+1) - m(m+1) = (j-m)(j+m+1) = \big|A_{jm}\big|^2 \,. \tag{3.3.13}$$

ここで

$$A_{jm} = \big\langle j,m+1\big|J_+\big|j,m\big\rangle = \big\langle j,m\big|J_-\big|j,m+1\big\rangle^* \,. \tag{3.3.14}$$

である．

　同様にして，次の式

$$J_zJ_- = J_-(J_z-1) \tag{3.3.15}$$

から出発すると，

$$J_zJ_-\big|j,m\big\rangle = J_-\big|j,m\big\rangle(m-1) \tag{3.3.16}$$

および

$$\boldsymbol{J}^2J_-\big|j,m\big\rangle = J_-\big|j,m\big\rangle j(j+1) \,. \tag{3.3.17}$$

を得る．以上より

$$J_-\big|j,m\big\rangle = \big|j,m-1\big\rangle B_{jm} \tag{3.3.18}$$

となり，比例定数は次のようになる．

$$B_{jm} = \big\langle j,m-1\big|J_-\big|j,m\big\rangle = A^*_{jm-1} \,. \tag{3.3.19}$$

これより次の式が得られる．

$$\big|B_{jm}\big|^2 = (j+m)(j+1-m) \,. \tag{3.3.20}$$

ここでも一般に，もし j, m が固有値なら $j, m-1$ も固有値である．しかし正の値 $|B_{jm}|^2$ が負になってしまうので m をどこまでも減少させることはできない．実際，m の最小値を $\underline{m}$ とすると，$J_-|j, \underline{m}\rangle = 0$ より次の結果を得る．

$$\underline{m} = -j \; . \tag{3.3.21}$$

最大値 $\overline{m} = j$ から最小値 $\underline{m} = -j$ への降下は整数 $n = 0, 1, 2, \ldots$ と段階的になる．したがって以下のように $2j = n$ となる．

$$j = \tfrac{1}{2}n = 0, \tfrac{1}{2}, 1, \tfrac{3}{2}, 2, \ldots \; . \tag{3.3.22}$$

各 n，つまり j に対して可能な m の値は

$$m = j, j-1, \ldots, -(j-1), -j \tag{3.3.23}$$

となり，以下のように $n+1 = 2j+1$ 通りある．

j	0	$\frac{1}{2}$	1	$\frac{3}{2}$	2	$\ldots$
$2j+1$	1	2	3	4	5	$\ldots$

(3.3.24)

特に $j = \frac{1}{2}$, $2j+1 = 2$, $m = \pm\frac{1}{2}$ は明らかにシュテルン・ゲルラッハの系である．そこでは $\boldsymbol{J} = \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$ であり，$\boldsymbol{J}^2 = \frac{3}{4} = \frac{1}{2}(\frac{1}{2}+1)$ となる．

以上の結果をまとめると次のようになる．

$$\boldsymbol{J}^{2'} = j(j+1)\,, \quad j = \tfrac{1}{2}n\,, \quad J'_z = m = j, \ldots, -j\,,$$

$$\begin{aligned} J_+|j,m\rangle &= |j, m+1\rangle\sqrt{(j-m)(j+m+1)}\,, \\ J_-|j,m\rangle &= |j, m-1\rangle\sqrt{(j+m)(j-m+1)}\,. \end{aligned} \tag{3.3.25}$$

ここで通常の位相の取り方にしたがい，$A_{jm} \geq 0$ および $B_{jm} \geq 0$ とした．

3.4 スピンへの分解

次の組み合わせ

$$\begin{aligned} j - m &\equiv n_- = 0, 1, \ldots\,, \\ j + m &\equiv n_+ = 0, 1, \ldots \end{aligned} \tag{3.4.1}$$

は我々に別の記述を思いつかせる．まず

$$j = \tfrac{1}{2}(n_+ + n_-) = n\,, \quad m = \tfrac{1}{2}(n_+ - n_-) \tag{3.4.2}$$

に注意して，状態を n_+ と n_- で再指定すると

$$J_+|n_+,n_-\rangle = |n_+ + 1, n_- - 1\rangle\sqrt{n_-(n_+ + 1)}\ ,$$
$$J_-|n_+,n_-\rangle = |n_+ - 1, n_+ + 1\rangle\sqrt{n_+(n_- + 1)} \tag{3.4.3}$$

となる．

この式はある関係式を思い起こさせないだろうか？ 式(2.4.14)および(2.4.15)を思い出して欲しい．

$$y|n\rangle = |n-1\rangle\sqrt{n}\ , \quad y^\dagger|n\rangle = |n+1\rangle\sqrt{n+1}\ . \tag{3.4.4}$$

これはあたかも2つの独立な系 $y_+, y_+^\dagger$ と $y_-, y_-^\dagger$ があり，その複合系は $|n_+,n_-\rangle = |n_+\rangle|n_-\rangle$ となり，以下の演算子で結ばれている．

$$J_+ = y_+^\dagger y_-\ , \quad J_- = y_-^\dagger y_+\ . \tag{3.4.5}$$

さらに，

$$J_z = \tfrac{1}{2}(y_+^\dagger y_+ - y_-^\dagger y_-)\ , \qquad J_z' = m = \tfrac{1}{2}(n_+ - n_-) \tag{3.4.6}$$

であり，$j = \sqrt{j(j+1)+\frac{1}{4}} - \frac{1}{2}$ より

$$\sqrt{\boldsymbol{J}^2 + \tfrac{1}{4}} - \tfrac{1}{2} = \tfrac{1}{2}(y_+^\dagger y_+ + y_-^\dagger y_-) \tag{3.4.7}$$

となる．以下の式にも注意しよう．

$$J_x = \tfrac{1}{2}(J_+ + J_-) = \tfrac{1}{2}(y_+^\dagger y_- + y_-^\dagger y_+)\ ,$$
$$J_y = \tfrac{1}{2\mathrm{i}}(J_+ - J_-) = \tfrac{1}{2}(\mathrm{i}y_-^\dagger y_+ - \mathrm{i}y_+^\dagger y_-)\ . \tag{3.4.8}$$

ここで以下の2成分の演算子

$$y = \begin{pmatrix} y_+ \\ y_- \end{pmatrix}\ , \qquad y^\dagger = (y_+^\dagger, y_-^\dagger) \tag{3.4.9}$$

を導入すると，次のようになることがわかる．

$$\boldsymbol{J} = y^\dagger \tfrac{1}{2}\boldsymbol{\sigma} y\ , \quad \sqrt{\boldsymbol{J}^2 + \tfrac{1}{4}} - \tfrac{1}{2} = \tfrac{1}{2}y^\dagger y\ . \tag{3.4.10}$$

ここでベクトル $\boldsymbol{\sigma}$ のデカルト*座標成分は式(1.10.3)のパウリ行列である．

具体的な固有ベクトルの形は，

$$|n\rangle = \frac{(y^\dagger)^n}{\sqrt{n!}}|0\rangle \qquad \text{ただし}\quad y|0\rangle = 0 \tag{3.4.11}$$

を使い $j \pm m = n_\pm$ とすると次のようになる．

$$|j,m\rangle = \frac{(y_+^\dagger)^{j+m}(y_-^\dagger)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}|0\rangle \qquad \text{ただし}\quad \boldsymbol{J}|0\rangle = 0\ . \tag{3.4.12}$$

*René DESCARTES (1596–1650)

ここで $|0\rangle \equiv |j=0,m=0\rangle = |n_+=0,n_-=0\rangle$ である．この状態 $|0\rangle$ は角運動量がゼロの状態であり（たとえ $\boldsymbol{J}$ のすべての成分が値 0 を持っても，交換関係と矛盾しないことに注意しよう）回転に対して変化しないから

$$\delta|0\rangle = \mathrm{i}\delta\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{J}|0\rangle = 0 \tag{3.4.13}$$

となり，回転不変である．

$j=\frac{1}{2}$, $m=\pm\frac{1}{2}$ に対しては以下のようになる．

$$\left|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\right\rangle = y_+^\dagger|0\rangle\,,\quad \left|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle = y_-^\dagger|0\rangle\,. \tag{3.4.14}$$

つまり $|0\rangle$ に $y_\sigma^\dagger, \sigma=\pm1$ を作用させると角運動量が $j=\frac{1}{2}$，$m=\frac{1}{2}\sigma$ の状態を作ると解釈できることがわかる．これよりなぜ $\boldsymbol{J}$ を作るときに，σ 行列が現れたのかが以下の関係より理解できる．

$$\begin{aligned}\left\langle\tfrac{1}{2},m\middle|\boldsymbol{J}\middle|\tfrac{1}{2},m'\right\rangle\Big|_{m=\frac{1}{2}\sigma,m'=\frac{1}{2}\sigma'} &= \langle 0|y_\sigma\,\underbrace{y^\dagger\tfrac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}y}\,y_{\sigma'}^\dagger|0\rangle\,. \\ &= \sum_{\sigma'',\sigma'''} y_{\sigma''}^\dagger\langle\sigma''|\tfrac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}|\sigma'''\rangle y_{\sigma'''}\end{aligned} \tag{3.4.15}$$

ここで，y と $y^\dagger$ の交換関係をまとめると次のようになる．

$$[y_\sigma, y_{\sigma'}^\dagger] = \delta_{\sigma\sigma'}\,;\quad [y_\sigma, y_{\sigma'}] = 0\,;\quad [y_\sigma^\dagger, y_{\sigma'}^\dagger] = 0\,. \tag{3.4.16}$$

これを使うと

$$y_{\sigma'''}y_{\sigma'}^\dagger|0\rangle = (\delta_{\sigma'''\sigma'} + y_{\sigma'}^\dagger y_{\sigma'''})|0\rangle = |0\rangle\delta_{\sigma'''\sigma'} \tag{3.4.17}$$

および上記のエルミート共役 $(\sigma'\to\sigma, \sigma'''\to\sigma'')$ は次のようになる．

$$\langle 0|y_\sigma y_{\sigma''}^\dagger = \delta_{\sigma\sigma''}\langle 0|\,. \tag{3.4.18}$$

したがって次の式を得る．

$$\left\langle\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\sigma\middle|\boldsymbol{J}\middle|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\sigma'\right\rangle = \left\langle\sigma\middle|\tfrac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\middle|\sigma'\right\rangle\,. \tag{3.4.19}$$

これはもちろん $j=\frac{1}{2}$ に対しては $\boldsymbol{J}=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$ であることを意味している．

基本となる角運動量 $j=\frac{1}{2}$ はスピンと呼ばれる．式(3.4.12)の $|j,m\rangle$ は，$n=(j+m)+(j-m)=2j$ 個のスピンを生成することで角運動量 j,m の状態を作ることができるとして記述できる．そして $j+m$ 個の $+\frac{1}{2}$ スピンと $j-m$ 個の $-\frac{1}{2}$ スピンより J_z' は次のようになる．

$$+\tfrac{1}{2}(j+m) - \tfrac{1}{2}(j-m) = m\,. \tag{3.4.20}$$

完全を期するために

$$\boldsymbol{J} = \sum_{\sigma,\sigma'} y_\sigma^\dagger\left\langle\sigma\middle|\tfrac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\middle|\sigma'\right\rangle y_{\sigma'} \tag{3.4.21}$$

が $\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J}=\mathrm{i}\boldsymbol{J}$ という交換関係にしたがうかどうかを直接証明しよう．まず次の交換関係を見てみよう．

$$\left[y_\sigma^\dagger y_{\sigma'}, y_{\sigma''}^\dagger y_{\sigma'''}\right] = y_\sigma^\dagger(y_{\sigma''}^\dagger y_{\sigma'} + \delta_{\sigma'\sigma''})y_{\sigma'''} - y_{\sigma''}^\dagger(\delta_{\sigma'''\sigma} + y_\sigma^\dagger y_{\sigma'''})y_{\sigma'}$$
$$= \delta_{\sigma'\sigma''}y_\sigma^\dagger y_{\sigma'''} - \delta_{\sigma'''\sigma}y_{\sigma''}^\dagger y_{\sigma'}\ . \tag{3.4.22}$$

ここで $y_+^\dagger$ と $y_-^\dagger$ の積，または y_+ と y_- の積においては順番は問題にならないことを使った．この交換関係は以下のシュテルン・ゲルラッハのスピンの観測記号と同じ形をしていることに注意しよう．

$$\Big[\big|\sigma\sigma'\big|, \big|\sigma''\sigma'''\big|\Big] = \delta_{\sigma'\sigma''}\big|\sigma\sigma'''\big| - \delta_{\sigma'''\sigma'}\big|\sigma''\sigma'\big|\ . \tag{3.4.23}$$

もちろん，スピンの方は次のような積の性質

$$\big|\sigma\sigma'\big|\big|\sigma''\sigma'''\big| = \delta_{\sigma'\sigma''}\big|\sigma\sigma'''\big| \tag{3.4.24}$$

もあるが，y の方の積は以下のようになる（式(3.4.16)を参照せよ）．

$$y_\sigma^\dagger y_{\sigma'}y_{\sigma''}^\dagger y_{\sigma'''} = \delta_{\sigma'\sigma''}y_\sigma^\dagger y_{\sigma'''} + y_\sigma^\dagger y_{\sigma''}^\dagger y_{\sigma'}y_{\sigma'''}\ . \tag{3.4.25}$$

しかしながら，1 個のスピンの状態に演算すると

$$y_{\sigma'}y_{\sigma'''}\big|n=1\big\rangle = 0 \qquad \text{および} \qquad \big\langle n=1\big|y_\sigma^\dagger y_{\sigma''}^\dagger = 0 \tag{3.4.26}$$

となり，積も同じ形をしている．つまり，右に演算するとスピン σ' を消滅させる $\langle\sigma'|$ は，右に演算すると同じスピンを消滅させる $y_{\sigma'}$ で置き換えられる．同様に $|\sigma\rangle$ も $y_\sigma^\dagger$ で置き換えられている．ある系から同様な系へのこの種の拡張は通常第 2 量子化（多少誤った語法の感じがするが）と呼ばれる．さて 2 個の演算子（ここでは 1 個のスピンに対する演算子）の積はそれらの行列の積で表され，演算子の交換関係は対応する行列の交換関係となる．したがって $\boldsymbol{J}$ の交換関係は，交換関係の代数が同じなので実際次のようになる．

$$\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J} = \sum_{\sigma\sigma'} y_\sigma^\dagger\langle\sigma|\underbrace{\tfrac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\times\tfrac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}}_{=\mathrm{i}\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}}|\sigma'\rangle y_{\sigma'} = \mathrm{i}\boldsymbol{J}\ . \tag{3.4.27}$$

3.5　複合系の角運動量

角運動量 $\boldsymbol{J}$ を n 個のスピンの集まりとして扱うときに，直感的に J_z' は個々の値 $\pm\frac{1}{2}$ の和になることは自明だとしてきた．さてここではより一般的に複合系の角運動量について考察してみよう．交換する角運動量 $\boldsymbol{J_1}$ と $\boldsymbol{J_2}$ を持つ 2 つの部分の複合系につい

て考えよう．座標系の無限小回転は，2 つの部分系に対して同じように，そして独立に作用する．

$$
\begin{aligned}
U = U_1U_2 = U_2U_1 &= (1 + \mathrm{i}\delta\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{J_1})(1 + \mathrm{i}\delta\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{J_2}) \\
&= 1 + \mathrm{i}\delta\boldsymbol{\omega}\cdot(\boldsymbol{J_1} + \boldsymbol{J_2})\,. \qquad (3.5.1)
\end{aligned}
$$

したがって全角運動量は以下のように各々の和となる．

$$
\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J_1} + \boldsymbol{J_2}\,. \qquad (3.5.2)
$$

交換関係は次のようになる．

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{J}\times\boldsymbol{J} &= (\boldsymbol{J_1} + \boldsymbol{J_2})\times(\boldsymbol{J_1} + \boldsymbol{J_2}) \\
&= \underbrace{\boldsymbol{J_1}\times\boldsymbol{J_1}}_{=\mathrm{i}\boldsymbol{J}_1} + \underbrace{\boldsymbol{J_1}\times\boldsymbol{J_2} + \boldsymbol{J_2}\times\boldsymbol{J_1}}_{=0} + \underbrace{\boldsymbol{J_2}\times\boldsymbol{J_2}}_{=\mathrm{i}\boldsymbol{J}_2} \\
&= \mathrm{i}\boldsymbol{J}\,. \qquad (3.5.3)
\end{aligned}
$$

それでは j_1 と j_2 から決まる $j\,(\boldsymbol{J}^{2'} = j(j+1))$ はどんな値をとるのだろうか？ まず簡単に計算できる場合について議論をしてみよう．$m = m_1 + m_2$ の最大値は $m = j_1 + j_2$ であり，一意的である．つまり $(m_1, m_2) = (j_1, j_2)$ の組だけである．したがって j の最大値は $j_{\max} = j_1 + j_2$ である．このときは $m = j_1 + j_2, j_1 + j_2 - 1, \ldots, -(j_1 + j_2 - 1), -(j_1 + j_2)$ となる．さて，次に $m = j_1 + j_2 - 1$ について考えよう．これは $(m_1, m_2) = (j_1 - 1, j_2)$ および $(m_1, m_2) = (j_1, j_2 - 1)$ の 2 通りがある．この状態はすでに $j = j_1 + j_2$ で $m = j_1 + j_2 - 1$ の状態に 1 個含まれている．したがって，もう 1 つ別の状態が存在し，そこでは $m = j_1 + j_2 - 1$ が最大となる，つまり，$j = j_1 + j_2 - 1$ でなければならない．同様にして $m = j_1 + j_2 - 2$ に対しては(一般には)3 通り，つまり $(m_1, m_2) = (j_1 - 2, j_2), (j_1 - 1, j_2 - 1), (j_1, j_2 - 2)$ があるが，ここで 2 通りは $j = j_1 + j_2$ と $j = j_1 + j_2 - 1$ であり，3 番目の状態では $m = j_1 + j_2 - 2$ が最大となり $j = j_1 + j_2 - 2$ でなければならない．それでは上記の議論はどこまで続けられるのだろうか？ もちろん全体の状態の数は有限であるからどこかで限界に達するはずである．そこで $m = j_1 + j_2 - \Delta j$ とすると $(m_1, m_2) = (j_1 - \Delta j, j_2), \ldots, (j_1, j_2 - \Delta j)$ の $\Delta j + 1$ 通りが考えられる．しかし，もし $j_2 \le j_1$ とすると，$\Delta j = 2j_2$ のときに m_2 はとり得るすべての値 $m_2 = j_2, \ldots, -j_2$ を尽くす．このことはもし Δj を 1 増加させて $2j_2 + 1$ としても状態の数を増やすことができないことを意味する．つまり j の最小値は $j_{\min} = j_1 + j_2 - 2j_2 = |j_1 - j_2|$ である．ここで絶対値で書いた形は一般的に $j_2 > j_1$ でも成立する．ここで得られた以下の結果

$$
\begin{gathered}
j_1 + j_2 \ge j \ge |j_1 - j_2|\,, \\
j \ge m \ge -j \qquad (3.5.4)
\end{gathered}
$$

は，次のように状態の数を数えることで確めることができる．状態数は $j_1 \geq j_2$ として，以下のようになる．

$$\sum_{j=j_1-j_2}^{j_1+j_2} (2j+1) = \underbrace{(2j_1+1)}_{\text{平均値}} \times \underbrace{(2j_2+1)}_{\text{項の数}} . \tag{3.5.5}$$

次に具体的な状態の作り方を調べるために，2個のスピン，$j_1 = j_2 = \frac{1}{2}$ の場合について考えよう．まず最大の m の場合は次のようになる．

$$m = j = 1: \quad \left|1,1\right\rangle \equiv \left|++\right\rangle, \text{ つまり } m_1 = m_2 = +\tfrac{1}{2} . \tag{3.5.6}$$

この状態は2個のスピンを交換しても完全に対称であることに注目しよう．つまり $1 \leftrightarrow 2$ としても，ベクトルは不変である．ここで $j = 1$ の他の状態を作るために式(3.3.25)を使おう．

$$J_-\left|j,m\right\rangle = \left|j,m-1\right\rangle\sqrt{(j+m)(j-m+1)} . \tag{3.5.7}$$

$j = 1$ であるから，以下のようになる．

$$J_-\left|1,1\right\rangle = \left|1,0\right\rangle\sqrt{2} ; \qquad J_-\left|1,0\right\rangle = \left|1,-1\right\rangle\sqrt{2} . \tag{3.5.8}$$

ここで1個のスピンについては $j = \frac{1}{2}$ の次の性質

$$J_-\underbrace{\left|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\right\rangle}_{\equiv\left|+\right\rangle} = \underbrace{\left|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle}_{\equiv\left|-\right\rangle}, \quad J_-\underbrace{\left|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\right\rangle}_{=\left|-\right\rangle} = 0 \tag{3.5.9}$$

を使うと，$\left|1,1\right\rangle = \left|++\right\rangle$ より，以下の結果を得る．

$$\begin{aligned}\left|1,0\right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(J_{1-} + J_{2-}\right)\left|++\right\rangle \\ &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|-+\right\rangle + \left|+-\right\rangle\right) .\end{aligned} \tag{3.5.10}$$

これは規格化されており，1と2について対称である．さらに m を下げると次のようになる．

$$\begin{aligned}\left|1,-1\right\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}\left(J_{1-} + J_{2-}\right)\frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|-+\right\rangle + \left|+-\right\rangle\right) \\ &= \frac{1}{2}\left(\left|--\right\rangle + \left|--\right\rangle\right) = \left|--\right\rangle .\end{aligned} \tag{3.5.11}$$

この結果は位相を除くと直接書き下すことができたものである（$m = -1$ の状態は一意的に決まるから）．これで $j = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$ の状態が $2j+1 = 3$ 通りできた．$2 \times 2 = 4$ 個の状態より作られる残りの状態は $j = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0$ で $2j+1 = 1$ 通りの状態である．この $m = 0$ の状態は，$\left|1,0\right\rangle$ と直交する組み合わせとして，位相を除くと次のようになる．

$$\left|0,0\right\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(\left|-+\right\rangle - \left|+-\right\rangle\right) . \tag{3.5.12}$$

この状態は $1 \leftrightarrow 2$ の交換のもとで，$-$ 符号が付き反対称である．

この $3+1$ 個の状態の対称性は演算子で表すことができる．まず次の値

$$\boldsymbol{J}^{2'} = j(j+1) = \begin{cases} 2 & (j=1)\,, \\ 0 & (j=0) \end{cases} \tag{3.5.13}$$

に注意すると，

$$(\boldsymbol{J}^2 - 1)' = \begin{cases} +1 & (j=1)\,, \\ -1 & (j=0) \end{cases} \tag{3.5.14}$$

となるので，交換演算子 P_{12}，つまり $1 \leftrightarrow 2$ の交換に対して対称か反対称かを調べる演算子は以下のように書ける．

$$\begin{aligned} P_{12} &= \left(\tfrac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_1 + \tfrac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_2\right)^2 - 1 = \tfrac{3}{4} + \tfrac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2 + \tfrac{3}{4} - 1 \\ &= \tfrac{1}{2}\left(1 + \boldsymbol{\sigma}_1 \cdot \boldsymbol{\sigma}_2\right)\ . \end{aligned} \tag{3.5.15}$$

この演算子は次の性質を持つ．

$$P_{12}\big|\sigma_1', \sigma_2''\big\rangle = \big|\sigma_1'', \sigma_2'\big\rangle\ . \tag{3.5.16}$$

n 個のスピンの場合，$m = j = \frac{1}{2}n$ の状態は以下のようになる．

$$\big|\underbrace{+ + \cdots +}_{n}\big\rangle \tag{3.5.17}$$

これは n 個のすべてのスピンに対して完全対称である．$j = \frac{1}{2}n$ の他の m の状態はスピンの交換に対して対称な演算子 J_- を順次掛けていけば作ることができるので，やはり完全対称となる．j の最大値を与えるのはこの完全対称性なのである．そしてこれは以下の状態を作るときにすでに示されたことである（式 (3.4.12) を参照）．

$$\big|j, m\big\rangle = \frac{1}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}\,\underbrace{y_+^\dagger y_+^\dagger \cdots}_{j+m}\,\underbrace{y_-^\dagger y_-^\dagger \cdots}_{j-m}\big|0\big\rangle\ . \tag{3.5.18}$$

なぜなら，これらすべての演算子は交換し，個々のスピンと関係しているわけではないからである．

無限小回転の繰り返し，たとえば z の周りの無限小回転の繰り返しは有限角度の回転を生成する．

$$\begin{aligned} U(\varphi) &= \underbrace{(1 + \mathrm{i}\delta\varphi J_z)(1 + \mathrm{i}\delta\varphi J_z)\cdots(1 + \mathrm{i}\delta\varphi J_z)}_{(\varphi/\delta\varphi \gg 1\,)\text{ 個の積}} \\ &= \lim_{\delta\varphi \to 0}(1 + \mathrm{i}\delta\varphi J_z)^{\varphi/\delta\varphi} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi J_z}\ . \end{aligned} \tag{3.5.19}$$

この結果を使うと，より簡潔に 2 個の角運動量の合成則を導くことができる．まずこ

の演算子のトレースは次のようになる．

$$\mathrm{tr}_{(j)}\left\{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi J_z}\right\} = \sum_{m=-j}^{j} \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}(j+1)\varphi} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}j\varphi}}{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} - 1}$$
$$= \frac{\sin\left((j+\frac{1}{2})\varphi\right)}{\sin(\frac{1}{2}\varphi)} \ . \tag{3.5.20}$$

ここで $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{J_1} + \boldsymbol{J_2}$ について考えると，

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi J_z} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi J_{1z}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi J_{2z}} \tag{3.5.21}$$

となる．この演算子は次のような対角要素

$$\left\langle j_1, m_1; j_2, m_2\right|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi J_z}\left|j_1, m_1; j_2, m_2\right\rangle = \left\langle j_1, m_1\right|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi J_{1z}}\left|j_1, m_1\right\rangle \times \left\langle j_2, m_2\right|\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi J_{2z}}\left|j_2, m_2\right\rangle \tag{3.5.22}$$

を持つから，与えられた j_1, j_2 に対して，m_1 と m_2 で和をとるとトレースは次のようになる．

$$\mathrm{tr}_{(j_1,j_2)}\left\{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi J_z}\right\} = \mathrm{tr}_{(j_1)}\left\{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi J_{1z}}\right\}\mathrm{tr}_{(j_2)}\left\{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi J_{2z}}\right\}$$
$$= \sum_{m_1,m_2} \mathrm{e}^{\mathrm{i}(m_1+m_2)\varphi} \ . \tag{3.5.23}$$

ここでこのトレースは以下の形に変形できる．

$$\mathrm{tr}_{(j_1)}\left\{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi J_{1z}}\right\}\mathrm{tr}_{(j_2)}\left\{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi J_{2z}}\right\} = \frac{\sin\left((j_1+\frac{1}{2})\varphi\right)}{\sin(\frac{1}{2}\varphi)}\,\frac{\sin\left((j_2+\frac{1}{2})\varphi\right)}{\sin(\frac{1}{2}\varphi)}$$
$$= \frac{-\cos\left((j_1+j_2+1)\varphi\right) + \cos\left(|j_1-j_2|\varphi\right)}{2\sin^2(\frac{1}{2}\varphi)}$$
$$= \frac{-\displaystyle\sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}\left[\cos\left((j+1)\varphi\right) - \cos(j\varphi)\right]}{2\sin^2(\frac{1}{2}\varphi)} \tag{3.5.24}$$

ここで $j+1 = (j+\frac{1}{2}) + \frac{1}{2}, j = (j+\frac{1}{2}) - \frac{1}{2}$ に注意して，最後の部分を三角関数の公式を使って書き直すと

$$\mathrm{tr}_{(j_1)}\left\{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi J_{1z}}\right\}\mathrm{tr}_{(j_2)}\left\{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi J_{2z}}\right\} = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} \frac{\sin\left((j+\frac{1}{2})\varphi\right)}{\sin(\frac{1}{2}\varphi)}$$
$$= \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2}\sum_{m=-j}^{j} \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\varphi} \tag{3.5.25}$$

となり，m_1, m_2 全体は以下のような全角運動量の固有値に分類できる（式(3.5.4)を参照）．

$$j \geq m \geq -j, \quad j_1 + j_2 \geq j \geq |j_1 - j_2| \,. \tag{3.5.26}$$

さらに $\varphi = 0$ とおくと，以下のような状態の数に関する等式を導出できる（式(3.5.5)を参照）．

$$(2j_1+1)(2j_2+1) = \sum_{j=|j_1-j_2|}^{j_1+j_2} (2j+1) \,. \tag{3.5.27}$$

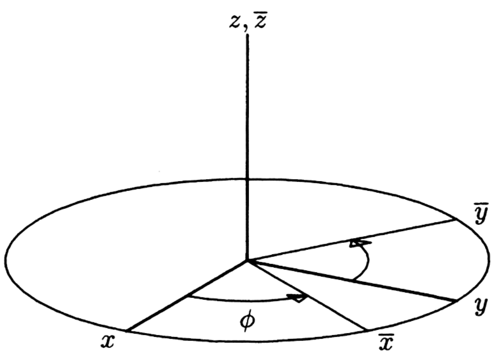
3.6　有限角度の回転：オイラー角

座標系を変換することで，z 軸の周りの回転はある単位ベクトル $\boldsymbol{n}$ で与えられる方向の軸の周りの回転となる．ここで回転角を γ とすると，任意の回転を表す以下のユニタリー演算子を得る．

$$U = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}} \,. \tag{3.6.1}$$

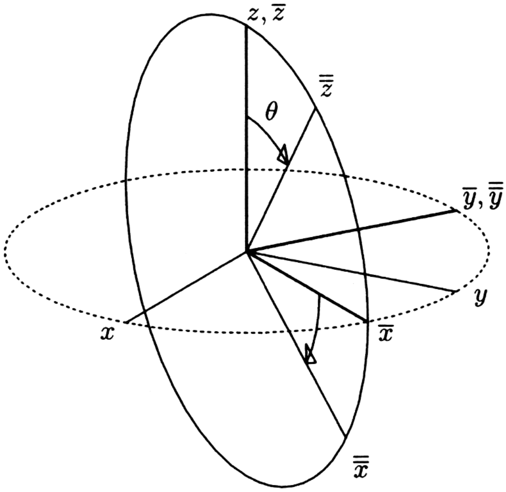
この回転を記述するのに 3 個の角度，つまり，$\boldsymbol{n}$ を決めるための 2 個と γ が必要なことに注意しよう．3 個の角度を選ぶためにはこれ以外の選び方も便利である．オイラーによって導入されたものは，連続する 3 回の座標系の回転である．

1. 元の z 軸の周りでの角度 ϕ の回転：



$$U_1 = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi J_z} \,, \qquad \overline{\boldsymbol{J}} = U_1^{-1} \boldsymbol{J} U_1 \,. \tag{3.6.2}$$

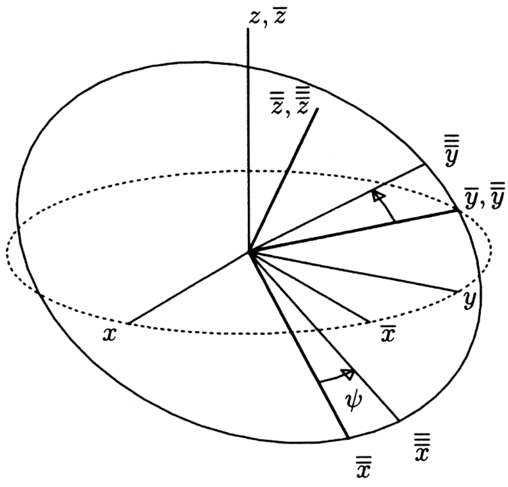
2. 新しい y 軸の周りでの角度 θ の回転：



$$\overline{U}_2 = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta \overline{J}_y} = U_1^{-1} \underbrace{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta J_y}}_{=U_2} U_1 \ ,$$

$$\overline{\overline{\boldsymbol{J}}} = \overline{U}_2^{-1} \overline{\boldsymbol{J}}\, \overline{U}_2 = \overline{U}_2^{-1} U_1^{-1} \boldsymbol{J} U_1 \overline{U}_2 = U_1^{-1} U_2^{-1} \boldsymbol{J} U_2 U_1 \ . \tag{3.6.3}$$

3. 新しい z 軸の周りでの角度 ψ の回転：



$$\overline{\overline{U}}_3 = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\psi \overline{\overline{J}}_z} = U_1^{-1} U_2^{-1} \underbrace{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\psi J_z}}_{=U_3} U_2 U_1 = (U_2 U_1)^{-1} (U_3 U_2 U_1) \ ,$$

$$\overline{\overline{\overline{\boldsymbol{J}}}} = \overline{\overline{U}}_3^{-1} \overline{\overline{\boldsymbol{J}}}\, \overline{\overline{U}}_3 = \left[(U_3 U_2 U_1)^{-1} (U_2 U_1)\right] \left[(U_2 U_1)^{-1} \boldsymbol{J} (U_2 U_1)\right] \times \left[(U_2 U_1)^{-1} (U_3 U_2 U_1)\right] \tag{3.6.4}$$

つまり

$$\overline{\overline{\overline{\boldsymbol{J}}}} = U^{-1}\boldsymbol{J}U \quad ここで\ U = U_3U_2U_1 \tag{3.6.5}$$

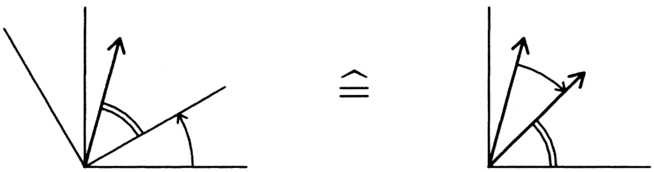
となる．ここで以下のように，各々の作用がその前の座標系で定義されている一連の変換

$$U = U_1\overline{U}_2\overline{\overline{U}}_3 \tag{3.6.6}$$

を行った結果は，以下のように同じ座標系，つまり元の座標系で定義された 3 個の変換の，逆順での積になっている．

$$U = U_3U_2U_1\ . \tag{3.6.7}$$

この結果を得るもう 1 つの方法として，始めに(2 次元での)ユークリッド座標系と類比させてみよう．



ベクトルを固定して座標系を(反時計回りに)回すか，または座標系を固定してベクトルを(時計回りに)回すかでは，ベクトルと座標系の間の最終的な関係は同じである．そこであるベクトル $|\ \rangle$ に対する座標系 $\langle a'|\ \rangle$ について考え，この座標系を変換しよう(これは基準系の変換によって引き起こされる)．

$$\langle a'| \to \overline{\langle a'|} = \langle a'|U_1\ . \tag{3.6.8}$$

すると

$$\langle a'|\ \rangle \to \langle a'|U_1|\ \rangle \tag{3.6.9}$$

の関係より，実際以下のように座標系を変化させずにベクトルを変化させたことになる．

$$|\ \rangle \to U_1|\ \rangle\ . \tag{3.6.10}$$

ここで，さらに座標系を $\langle a'| \to \langle a'|U_2$ のように変化させたとすると，次のようになる．

$$\langle a'|\ \rangle \underset{U_1}{\longrightarrow} \langle a'|U_1|\ \rangle \underset{U_2}{\longrightarrow} \langle a'|U_2U_1|\ \rangle\ . \tag{3.6.11}$$

この結果より明らかなように一連の変換に対して，最終的な変換の演算子は以下のようになる．

$$U = \cdots U_3U_2U_1\ . \tag{3.6.12}$$

したがって，オイラー角に対しては次の式のようになる．

$$U(\underbrace{\psi,\theta,\phi}_{\equiv\omega}) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\psi J_z}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta J_y}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi J_z}\ . \tag{3.6.13}$$

これらに関しての別例は，問題 2-17d を参照のこと．

これら 3 個の角度に対する依存性から，演算子 $\boldsymbol{J}$ の 3 成分を微分演算子で表現することができる．そこで $\langle\omega| = \langle\ |U(\omega)$ について考えよう．まず次の関係式

$$\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\phi}U(\omega) = U(\omega)J_z \tag{3.6.14}$$

より次の式を得る．

$$\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\phi}\langle\omega| = \langle\omega|J_z\ . \tag{3.6.15}$$

次に θ で微分した式

$$\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\theta}U(\omega) = U(\omega)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi J_z}\,J_y\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi J_z} \tag{3.6.16}$$

は z 軸の周りの回転を表す次の関係式の第 2 式目を含んでいる．

$$\begin{aligned} J_x(\phi) &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi J_z}\,J_x\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi J_z} = J_x\cos\phi + J_y\sin\phi\ , \\ J_y(\phi) &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi J_z}\,J_y\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi J_z} = J_y\cos\phi - J_x\sin\phi\ . \end{aligned} \tag{3.6.17}$$

これらの式は，幾何学的なことは別として，次の微分方程式を使って示すことができる．

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial\phi}J_x(\phi) &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi J_z}\mathrm{i}\,[J_x, J_z]\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi J_z} = J_y(\phi)\ , \\ \frac{\partial}{\partial\phi}J_y(\phi) &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi J_z}\mathrm{i}\,[J_y, J_z]\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi J_z} = -J_x(\phi)\ . \end{aligned} \tag{3.6.18}$$

ここで $J_\pm(\phi) = J_x(\phi) \pm \mathrm{i}J_y(\phi)$ と定義すると，微分方程式は

$$\frac{\partial}{\partial\phi}J_+(\phi) = -\mathrm{i}J_+(\phi)\ ,\quad \frac{\partial}{\partial\phi}J_-(\phi) = \mathrm{i}J_-(\phi) \tag{3.6.19}$$

と書け，

$$J_+(\phi) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}J_+\ ,\quad J_-(\phi) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}J_- \tag{3.6.20}$$

を得る．ここで $J_x(\phi) = \frac{1}{2}[J_+(\phi) + J_-(\phi)]$,$J_y(\phi) = \frac{1}{2\mathrm{i}}[J_+(\phi) - J_-(\phi)]$ だから式(3.6.17)が得られる．したがって θ での微分について次の式が得られた．

$$\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\theta}\langle\omega| = \langle\omega|\,(-J_x\sin\phi + J_y\cos\phi)\ . \tag{3.6.21}$$

最後に，ψ での微分について考えると，以下のようになる．

$$\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\psi}U(\omega) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\psi J_z}J_z\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta J_y}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi J_z} = U(\omega)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi J_z}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\theta J_y}\,J_z\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta J_y}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi J_z}\ . \tag{3.6.22}$$

ここで式(3.6.17)で $x \to z,\ z \to y,\ y \to x,\ \phi \to \theta$ とすると

$$
\begin{aligned}
\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\psi}U(\omega) &= U(\omega)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi J_z}\,(J_z\cos\theta + J_x\sin\theta)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi J_z} \\
&= U(\omega)\,(J_x\sin\theta\cos\phi + J_y\sin\theta\sin\phi + J_z\cos\theta)
\end{aligned} \tag{3.6.23}
$$

となり

$$
\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\psi}\langle\omega| = \langle\omega|\,(J_x\sin\theta\cos\phi + J_y\sin\theta\sin\phi + J_z\cos\theta) \tag{3.6.24}
$$

となる．これと ϕ についての微分の式を組み合わせると次のように書ける．

$$
\frac{1}{\sin\theta}\left(\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\psi} - \cos\theta\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\langle\omega| = \langle\omega|\,(J_x\cos\phi + J_y\sin\phi)\ . \tag{3.6.25}
$$

式(3.6.24)はある程度予想できたものである．角度 ψ は極座標で θ, ϕ で与えられた方向にある新しい z 軸の周りでの回転角度である．そして式に現れているのは $\boldsymbol{J}$ のその方向の成分である．

さて θ についての式(3.6.21)に $\pm\mathrm{i}$ を掛けて，上式に加えると以下の結果を得る．

$$
\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\phi}\left[\pm\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin\theta}\left(\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\psi} - \cos\theta\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\right]\langle\omega| = \langle\omega|J_\pm\ . \tag{3.6.26}
$$

同様にして，$\boldsymbol{J}^2$ に対する微分で表した式は

$$
\boldsymbol{J}^2 = J_-J_+ + J_z^2 + J_z \tag{3.6.27}
$$

を使うと

$$
\begin{aligned}
\langle\omega|\boldsymbol{J}^2 = \Bigg\{ &\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}\left[-\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin\theta}\left(\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\psi} - \cos\theta\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\right] \\
&\times\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\left[\frac{\partial}{\partial\theta} + \frac{1}{\sin\theta}\left(\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\psi} - \cos\theta\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)\right] \\
&+ \left(\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\phi}\right)^2 + \frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\phi}\Bigg\}\langle\omega|
\end{aligned} \tag{3.6.28}
$$

となり，これは次のようにも書ける．

$$
\langle\omega|\boldsymbol{J}^2 = \left[-\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} - \cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta} - \frac{1}{\sin^2\theta}\left(\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} - 2\cos\theta\frac{\partial}{\partial\phi}\frac{\partial}{\partial\psi} + \frac{\partial^2}{\partial\psi^2}\right)\right]\langle\omega|\ . \tag{3.6.29}
$$

たった 1 つではあるが，ここでこの微分方程式の応用を考えてみよう．そのためには次のように書いておくと便利である．

$$
\frac{\partial^2}{\partial\theta^2} + \cot\theta\frac{\partial}{\partial\theta} = \frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}\ . \tag{3.6.30}
$$

さて今から通常の3次元極座標の角度 $\sin\theta \mathrm{d}\theta \mathrm{d}\phi$ と $\mathrm{d}\psi$ を組み合わせたすべての角度で積分してみよう．積分範囲はどのようになるだろうか？ 角度 θ については，$\sin\theta$ がゼロとなることで $0 \to \pi$ である．しかし $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi J_z}, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\psi J_z}$ のなかに現れる ϕ と ψ については，J_z' が整数以外に $\pm\frac{1}{2}, \pm\frac{3}{2}, \ldots$ の値もとれることから，周期性を保つために積分の範囲は $\phi : 0 \to 4\pi$，$\psi : 0 \to 4\pi$ となる．ここで規格化された「体積」を以下のように定義しよう．

$$\mathrm{d}\omega = \frac{1}{2}\sin\theta \mathrm{d}\theta \frac{1}{4\pi}\mathrm{d}\phi \frac{1}{4\pi}\mathrm{d}\psi\,, \qquad \int \mathrm{d}\omega = 1\,. \tag{3.6.31}$$

すると $U(\omega)$ のしたがう微分方程式を積分した結果は，$\partial/\partial\phi$ および $\partial/\partial\psi$ の項は周期性より消え，また θ の微分の項も以下のようにゼロとなる．

$$\int_0^\pi \mathrm{d}\theta \frac{\partial}{\partial\theta}\left(\sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta}U(\omega)\right) = \sin\theta \frac{\partial}{\partial\theta}U\bigg|_0^\pi = 0\,. \tag{3.6.32}$$

要約すると以下のようになる．

$$\int \mathrm{d}\omega\, U(\omega)\boldsymbol{J}^2 = 0\,. \tag{3.6.33}$$

このことは次のことを意味している．

$$\int \mathrm{d}\omega\, U(\omega) = |00|\,. \tag{3.6.34}$$

これは固有値が $\boldsymbol{J}^{2'} = 0$ である，$j = 0$ の状態を選択する記号である．ここで比例定数が正しいかどうかについては次式に注目すればよい．

$$|00||00| = |00| \int \mathrm{d}\omega\, U(\omega)\,. \tag{3.6.35}$$

ここで $\boldsymbol{J}^{2'} = 0$ つまり $\boldsymbol{J} = 0$ を選択するということは $U(\omega) = 1$ を意味し，このときは $\int \mathrm{d}\omega = 1$ であるから，右辺はちょうど $|00|$ となる．もっと簡単に言うと演算子 $|00|$ は $\boldsymbol{J}^2 = 0$ の状態に対しては値1をもつ．

3.7　回転した系での角運動量の固有ベクトル

以下の固有ベクトルが与えられている．

$$\langle j, m| = \langle 0| \frac{y_+^{j+m} y_-^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}\,. \tag{3.7.1}$$

回転した系ではこのベクトルはどのようになるだろうか？

$$\begin{aligned}\langle j, m; \omega| &= \langle j, m|U(\omega) = \langle 0| \frac{y_+^{j+m} y_-^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}} U(\omega) \\ &= \langle 0| \frac{\overline{y}_+^{j+m} \overline{y}_-^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}\,.\end{aligned} \tag{3.7.2}$$

先の説明で，$\langle 0|U(\omega) = \langle 0|$ を使い，次のように(式(3.6.2)–(3.6.5)では $\overline{y}$ ではなく $\overline{\overline{y}}$ と書いた)定義した．

$$\overline{y} = U^{-1} y U \,. \tag{3.7.3}$$

右辺を計算するために式(3.6.1)の $U(\omega)$ を微分しよう．

$$\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\gamma}\overline{y} = \frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\gamma}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}}\,y\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}} = U^{-1}\,[y, \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}]\,U \,. \tag{3.7.4}$$

ここで交換関係は

$$\begin{aligned}
[y_\sigma, \boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{J}] &= \Big[y_\sigma, \sum_{\sigma',\sigma''} y^\dagger_{\sigma'}\langle\sigma'|\boldsymbol{n}\cdot\tfrac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}|\sigma''\rangle y_{\sigma''}\Big] \\
&= \sum_{\sigma',\sigma''}\underbrace{[y_\sigma, y^\dagger_{\sigma'}]}_{=\delta(\sigma,\sigma')}\langle\sigma'|\boldsymbol{n}\cdot\tfrac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}|\sigma''\rangle y_{\sigma''} \\
&= \sum_{\sigma''}\langle\sigma|\boldsymbol{n}\cdot\tfrac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}|\sigma''\rangle y_{\sigma''} = \big(\boldsymbol{n}\cdot\tfrac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}y\big)_\sigma
\end{aligned} \tag{3.7.5}$$

となるので

$$\frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\gamma}\overline{y} = \boldsymbol{n}\cdot\tfrac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\overline{y} \tag{3.7.6}$$

となり

$$\overline{y} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma\boldsymbol{n}\cdot\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}}y = \mathcal{U}y \tag{3.7.7}$$

を得る．ここで $\mathcal{U}$ は 2×2 の行列で，$j=\frac{1}{2}$ の場合の U である．

オイラー角を使うと $\mathcal{U}$ は

$$\mathcal{U} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\psi\frac{1}{2}\sigma_z}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta\frac{1}{2}\sigma_y}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi\frac{1}{2}\sigma_z} \tag{3.7.8}$$

となり，具体的には以下の行列となる．

$$\mathcal{U} = \begin{pmatrix} \mathcal{U}_{++} & \mathcal{U}_{+-} \\ \mathcal{U}_{-+} & \mathcal{U}_{--} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\psi}{2}}\cos\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} & \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\psi}{2}}\sin\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} \\ -\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\psi}{2}}\sin\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} & \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\psi}{2}}\cos\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} \end{pmatrix} . \tag{3.7.9}$$

ここで $\langle j,m;\omega|$ は

$$\langle j,m;\omega| = \sum_{m'}\underbrace{\langle j,m;\omega|j,m'\rangle}_{=\langle j,m|U(\omega)|j,m'\rangle}\langle j,m'| \tag{3.7.10}$$

のように，$\langle j,m'|$ の線形結合で書けることは，次の式を展開することからわかる．

$$\frac{\overline{y}_+^{\,j+m}\,\overline{y}_-^{\,j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}} = \sum_{m'}\langle j,m|U(\omega)|j,m'\rangle\frac{y_+^{j+m'}y_-^{j-m'}}{\sqrt{(j+m')!(j-m')!}} \,. \tag{3.7.11}$$

ただし

$$\overline{y}_+ = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\psi}{2}} \left(\cos\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} y_+ + \sin\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} y_- \right) ,$$
$$\overline{y}_- = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\psi}{2}} \left(-\sin\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} y_+ + \cos\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} y_- \right) \tag{3.7.12}$$

である．展開係数は次の関係から簡単化できる．

$$\langle j,m|U(\omega)|j,m'\rangle = \langle j,m|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\psi J_z}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta J_y}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi J_z}\,|j,m'\rangle$$
$$= \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\psi}\langle j,m|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta J_y}\,|j,m'\rangle\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}m'\phi} . \tag{3.7.13}$$

実際，上式の右辺の左側の係数は次の式の値

$$\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\psi}{2}}\right)^{j+m} \left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\psi}{2}}\right)^{j-m} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\psi} \tag{3.7.14}$$

と一致し，右側の係数も $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}}y_+$ と $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}}y_-$ が以下の形で現れることから出てくる．

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}m'\phi} y_+^{j+m'} y_-^{j-m'} = \left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} y_+\right)^{j+m'} \left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} y_-\right)^{j-m'} . \tag{3.7.15}$$

したがって $\psi = 0, \phi = 0$ として求めれば十分であり，以下の結果を得る．

$$\frac{\left(\cos\frac{\theta}{2}y_+ + \sin\frac{\theta}{2}y_-\right)^{j+m} \left(-\sin\frac{\theta}{2}y_+ + \cos\frac{\theta}{2}y_-\right)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}$$
$$= \sum_{m'} \underbrace{\langle j,m|\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta J_y}\,|j,m'\rangle}_{=U^{(j)}_{m,m'}(\theta)} \frac{y_+^{j+m'}\,y_-^{j-m'}}{\sqrt{(j+m')!(j-m')!}} . \tag{3.7.16}$$

例として $j = 1$ の結果を示そう．まず $m = 1$ とすると

<u>$m=1$:</u>

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\cos\frac{\theta}{2}\,y_+ + \sin\frac{\theta}{2}\,y_- \right)^2$$
$$= \cos^2\frac{\theta}{2}\frac{y_+^2}{\sqrt{2}} + \sqrt{2}\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2}\,y_+y_- + \sin^2\frac{\theta}{2}\frac{y_-^2}{\sqrt{2}} \tag{3.7.17}$$

となり

$$U^{(1)}_{1,1}(\theta) = \cos^2\frac{\theta}{2} , \quad U^{(1)}_{1,0}(\theta) = \sqrt{2}\cos\frac{\theta}{2}\sin\frac{\theta}{2} , \quad U^{(1)}_{1,-1}(\theta) = \sin^2\frac{\theta}{2} \tag{3.7.18}$$

を得る．$m = 0$ に対しては

<u>$m=0$:</u>

$$\left(\cos\frac{\theta}{2}\,y_+ + \sin\frac{\theta}{2}\,y_- \right) \left(-\sin\frac{\theta}{2}\,y_+ + \cos\frac{\theta}{2}\,y_- \right)$$
$$= -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta\,\frac{y_+^2}{\sqrt{2}} + \cos\theta\,y_+y_- + \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta\,\frac{y_-^2}{\sqrt{2}} \tag{3.7.19}$$

となり

$$U_{0,1}^{(1)}(\theta) = -\frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta\,, \qquad U_{0,0}^{(1)}(\theta) = \cos\theta\,, \qquad U_{0,-1}^{(1)}(\theta) = \frac{1}{\sqrt{2}}\sin\theta \tag{3.7.20}$$

を得る．$m = -1$ の場合も同様で

$$\underline{m=-1:} \qquad \frac{1}{\sqrt{2}}\left(-\sin\frac{\theta}{2}\,y_+ + \cos\frac{\theta}{2}\,y_-\right)^2$$
$$= \sin^2\frac{\theta}{2}\frac{y_+^2}{\sqrt{2}} - \sqrt{2}\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\,y_+y_- + \cos^2\frac{\theta}{2}\frac{y_-^2}{\sqrt{2}} \tag{3.7.21}$$

となり

$$U_{-1,1}^{(1)}(\theta) = \sin^2\theta\,, \qquad U_{-1,0}^{(1)}(\theta) = -\sqrt{2}\sin\frac{\theta}{2}\cos\frac{\theta}{2}\,, \qquad U_{-1,-1}^{(1)}(\theta) = \cos^2\frac{\theta}{2} \tag{3.7.22}$$

を得る．

ここで得られた結果は，角度が θ である 2 つの異なる方向での，角運動量または磁気モーメントの観測と関係した確率の例である．

$$p(m,m';\theta) = \left|\langle j,m;\omega|j,m'\rangle\right|^2 = \left[U_{m,m'}^{(j)}(\theta)\right]^2 . \tag{3.7.23}$$

次の表に $j = 1$ の場合の確率をまとめておく．

$j = 1:$ (3.7.24)

m \ m'	1	0	-1
1	$\cos^4\frac{\theta}{2}$	$2\cos^2\frac{\theta}{2}\sin^2\frac{\theta}{2}$	$\sin^4\frac{\theta}{2}$
0	$\frac{1}{2}\sin^2\theta$	$\cos^2\theta$	$\frac{1}{2}\sin^2\theta$
-1	$\sin^4\frac{\theta}{2}$	$2\sin^2\frac{\theta}{2}\cos^2\frac{\theta}{2}$	$\cos^4\frac{\theta}{2}$

明らかに以下の関係式を満たしている．

$$p(m,m') = p(m',m)\,, \qquad \sum_m p(m,m') = 1\,, \qquad \sum_{m'} p(m,m') = 1\,. \tag{3.7.25}$$

別の特別な場合として，$m = 0$ としてみよう．このときは j は整数であることが必要であり，$l = 0, 1, 2, \ldots$ とする．すると展開式は以下のようになる（m' の代わりに m を使う）．

$$\frac{1}{l!}\left[\left(\cos\frac{\theta}{2}y_+ + \sin\frac{\theta}{2}y_-\right)\left(-\sin\frac{\theta}{2}y_+ + \cos\frac{\theta}{2}y_-\right)\right]^l$$
$$= \sum_{m=-l}^{l} U_{0,m}^{(l)}(\theta)\frac{y_+^{l+m}\,y_-^{l-m}}{\sqrt{(l+m)!(l-m)!}}\,. \tag{3.7.26}$$

ここで左辺は $y_+ \to y_-$, $y_- \to -y_+$ とすると $(-1)^l$ を掛けるだけなので，右辺は

$$(-1)^l \sum_{m=-l}^{l} U_{0,m}^{(l)}(\theta) \frac{y_-^{l+m}(-y_+)^{l-m}}{\sqrt{(l+m)!(l-m)!}}$$
$$\underset{\overbrace{m \to -m}}{\overset{\uparrow}{=}} \sum_{m=-l}^{l} (-1)^m U_{0,-m}^{(l)}(\theta) \frac{y_+^{l+m}\, y_-^{l-m}}{\sqrt{(l+m)!(l-m)!}} \tag{3.7.27}$$

に等しいことに注意すると，次の関係式を得る.

$$U_{0,m}^{(l)}(\theta) = (-1)^m U_{0,-m}^{(l)}(\theta) \, . \tag{3.7.28}$$

たとえば，式(3.7.20)の $U_{0,1}^{(1)} = -U_{0,-1}^{(1)}$ はその例である．$U_{0,m}^{(l)}(\theta)$ の具体的な表式を得るために

$$y_+ = \sin\theta \, , \qquad y_- = t - \cos\theta \tag{3.7.29}$$

とすると次の式を得る.

$$\begin{aligned} \cos\frac{\theta}{2} y_+ + \sin\frac{\theta}{2} y_- &= (t+1)\sin\frac{\theta}{2} \, , \\ -\sin\frac{\theta}{2} y_+ + \cos\frac{\theta}{2} y_- &= (t-1)\cos\frac{\theta}{2} \, . \end{aligned} \tag{3.7.30}$$

これを代入すると

$$(\sin\theta)^l \frac{(t^2-1)^l}{2^l l!} = \sum_{m=-l}^{l} U_{0,m}^{(l)}(\theta) \frac{(\sin\theta)^{l+m}(t-\cos\theta)^{l-m}}{\sqrt{(l+m)!(l-m)!}} \tag{3.7.31}$$

となり，これはテーラー級数展開の形をしている．左辺の微分より展開係数を求めると

$$(\sin\theta)^l \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\right)^{l-m} \frac{(t^2-1)^l}{2^l l!}\Bigg|_{t=\cos\theta} = U_{0,m}^{(l)}(\theta)(\sin\theta)^{l+m}\sqrt{\frac{(l-m)!}{(l+m)!}} \tag{3.7.32}$$

となるので次の式を得る.

$$U_{0,m}^{(l)}(\theta) = \sqrt{\frac{(l+m)!}{(l-m)!}}(\sin\theta)^{-m}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\cos\theta}\right)^{l-m} \frac{(\cos^2\theta-1)^l}{2^l l!} \, . \tag{3.7.33}$$

特に $U_{0,0}^{(l)}$ は次のようにルジャンドル*の多項式で与えられる.

$$U_{0,0}^{(l)}(\theta) = \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\cos\theta}\right)^l \frac{(\cos^2\theta-1)^l}{2^l l!} = \mathrm{P}_l(\cos\theta) \, . \tag{3.7.34}$$

たとえば $l=1$ は次のようになる.

$$U_{0,0}^{(1)}(\theta) = \cos\theta = \mathrm{P}_1(\cos\theta) \, . \tag{3.7.35}$$

---

*Adrien Marie LEGENDRE (1752–1833)

ここで結果がルジャンドルの多項式になったのは偶然なのだろうか？ どう見てもそうとは思えない．ではなぜそうなったかを見るために，角度 ϕ を残した式で考えてみよう．

$$y_+ \to y_+ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} , \qquad y_- \to y_- \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} , \qquad y_+^{l+m} y_-^{l-m} \to \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\phi} y_+^{l+m} y_-^{l-m} . \tag{3.7.36}$$

さて展開式では，次の式の l 乗が必要であった．

$$\begin{aligned}
&\left(\cos\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} y_+ + \sin\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} y_-\right)\left(-\sin\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} y_+ + \cos\frac{\theta}{2}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\phi}{2}} y_-\right) \\
&= -\frac{1}{2}\sin\theta\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi} y_+^2 + \frac{1}{2}\sin\theta\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi} y_-^2 + \cos\theta\, y_+ y_- \\
&= \frac{1}{2}\Big[\underbrace{\sin\theta\cos\phi}_{=x/r}\,\underbrace{(y_-^2 - y_+^2)}_{=\nu_x} + \underbrace{\sin\theta\sin\phi}_{=y/r}\,\underbrace{(-\mathrm{i}y_-^2 - \mathrm{i}y_+^2)}_{=\nu_y} + \underbrace{\cos\theta}_{=z/r}\,\underbrace{2y_+y_-}_{=\nu_z}\Big] \\
&= \frac{1}{2}\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{\nu} .
\end{aligned} \tag{3.7.37}$$

ただし r, θ, ϕ は点 $\boldsymbol{r}$ の極座標(単位ベクトル $\boldsymbol{n} = \boldsymbol{r}/r$ についての式(1.12.2)を参照)であり，ベクトル $\boldsymbol{\nu}$ の直交座標成分は以下で与えられる．

$$\boldsymbol{\nu} = \left(y_-^2 - y_+^2, -\mathrm{i}y_-^2 - \mathrm{i}y_+^2, 2y_+y_-\right) . \tag{3.7.38}$$

ここで

$$\boldsymbol{\nu}^2 = (y_-^2 - y_+^2)^2 + (\mathrm{i}y_-^2 + \mathrm{i}y_+^2)^2 + (2y_+y_-)^2 = 0 \tag{3.7.39}$$

となることから，ベクトル $\boldsymbol{\nu}$ は 2 乗すると 0 となる複素ベクトルであることに注意しよう．このベクトルの成分は，$y = \begin{pmatrix} y_+ \\ y_- \end{pmatrix}$ とその転置 $y^{\mathrm{T}} = (y_+, y_-)$ を使って，行列の形で表すと

$$\nu_x = y^{\mathrm{T}}(-\sigma_z)y , \qquad \nu_y = y^{\mathrm{T}}(-\mathrm{i})y , \qquad \nu_z = y^{\mathrm{T}}\sigma_x y \tag{3.7.40}$$

となるので以下の形に書ける．

$$\boldsymbol{\nu} = y^{\mathrm{T}}\frac{1}{\mathrm{i}}\sigma_y\boldsymbol{\sigma}y . \tag{3.7.41}$$

これより展開式は以下のようになる．

$$\frac{(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\nu})^l}{2^l l!} = \sum_{m=-l}^{l} r^l Y_{lm}(\theta,\phi)\sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}\frac{y_+^{l+m}y_-^{l-m}}{\sqrt{(l+m)!(l-m)!}} . \tag{3.7.42}$$

ここで展開係数を次のように書いた．

$$U_{0,m}^{(l)}(\theta)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\phi} = \sqrt{\frac{4\pi}{2l+1}}Y_{lm}(\theta,\phi) . \tag{3.7.43}$$

この式の左辺のラプラシアン*を計算すると

$$\nabla^2(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\nu})^l = \nabla\cdot l(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\nu})^{l-1}\boldsymbol{\nu} = l(l-1)(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\nu})^{l-2}\boldsymbol{\nu}^2 = 0 \tag{3.7.44}$$

となり，これはラプラス方程式の解である．$\boldsymbol{r}$ に関して l 次の同次の解は調和関数と呼ばれ，$r^l Y_{lm}(\theta,\phi)$ は調和関数である（球面調和関数という用語は $Y_{lm}(\theta,\phi)$ に対して用いられる）．ルジャンドルの多項式が ϕ に依存しない $m=0$ に対する調和関数の解になることはよく知られている．母関数の式(3.7.42)において $Y_{lm}(\theta,\phi)$ を定義したときに導入された係数は

$$\int \mathrm{d}\Omega\, Y_{lm}(\theta,\phi)^* Y_{l'm'}(\theta,\phi) = \delta_{ll'}\delta_{mm'} \quad \text{ただし}\ \mathrm{d}\Omega = \sin\theta\mathrm{d}\theta\mathrm{d}\phi \tag{3.7.45}$$

となる正規直交性を満たすようにしたため簡単な形となった．式(3.7.42)に基づく証明については問題3-14を参照して欲しい．

$\boldsymbol{\nu}$ はベクトルと認定されたが，本当にそうだろうか？ y を $\overline{y} = \mathcal{U}y$ に置き換えると以下のようになる．

$$\overline{\boldsymbol{\nu}} = (\mathcal{U}y)^{\mathrm{T}}\frac{1}{\mathrm{i}}\sigma_y\boldsymbol{\sigma}(\mathcal{U}y) = y^{\mathrm{T}}\mathcal{U}^{\mathrm{T}}\frac{1}{\mathrm{i}}\sigma_y\boldsymbol{\sigma}\mathcal{U}y\,. \tag{3.7.46}$$

次に式(1.10.3)のパウリのスピン行列の転置は，

$$\sigma_x^{\mathrm{T}} = \sigma_x\,, \qquad \sigma_y^{\mathrm{T}} = -\sigma_y\,, \qquad \sigma_z^{\mathrm{T}} = \sigma_z \tag{3.7.47}$$

となるので，

$$\boldsymbol{\sigma}^{\mathrm{T}} = -\sigma_y\boldsymbol{\sigma}\sigma_y \tag{3.7.48}$$

と書ける．以上の性質より次の変換

$$\mathcal{U} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma\boldsymbol{n}\cdot\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}} = \cos\frac{\gamma}{2} + \mathrm{i}\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\sin\frac{\gamma}{2} \tag{3.7.49}$$

の転置は

$$\mathcal{U}^{\mathrm{T}} = \cos\frac{\gamma}{2} - \mathrm{i}\sigma_y\boldsymbol{n}\cdot\boldsymbol{\sigma}\sigma_y\sin\frac{\gamma}{2} = \sigma_y\mathcal{U}^{-1}\sigma_y \tag{3.7.50}$$

となり

$$\mathcal{U}^{\mathrm{T}}\sigma_y = \sigma_y\mathcal{U}^{-1} \tag{3.7.51}$$

となるので，以下の結果を得る．

$$\overline{\boldsymbol{\nu}} = y^{\mathrm{T}}\frac{1}{\mathrm{i}}\sigma_y\mathcal{U}^{-1}\boldsymbol{\sigma}\mathcal{U}y\,. \tag{3.7.52}$$

ここで $\mathcal{U}^{-1}\boldsymbol{\sigma}\mathcal{U}$ は $\overline{\boldsymbol{\sigma}}$ とする変換である．特に微小変換に対しては

$$\mathcal{U} = 1 + \mathrm{i}\delta\boldsymbol{\omega}\cdot\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma} \tag{3.7.53}$$

---

*Marquis de Pierre Simon LAPLACE (1749–1827)

となるので，変換されたスピン行列は

$$\overline{\boldsymbol{\sigma}} = (1 - \mathrm{i}\delta\boldsymbol{\omega} \cdot \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma})\boldsymbol{\sigma}(1 + \mathrm{i}\delta\boldsymbol{\omega} \cdot \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma})$$

$$= \boldsymbol{\sigma} - \frac{1}{2\mathrm{i}}[\boldsymbol{\sigma}, \delta\boldsymbol{\omega} \cdot \boldsymbol{\sigma}] = \boldsymbol{\sigma} - \delta\boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{\sigma} \tag{3.7.54}$$

となる．したがって

$$\overline{\boldsymbol{\nu}} = \boldsymbol{\nu} - \delta\boldsymbol{\omega} \times \boldsymbol{\nu} \tag{3.7.55}$$

が得られ，$\boldsymbol{\nu}$ がベクトルであることがわかる．

$m = 0$ の場合にはどのようになるかがわかったので，一般的な場合に返って，同じ置き換えをしてみよう．式(3.7.16)に，式(3.7.29)と(3.7.30)を使うと

$$\frac{[(t+1)\sin\frac{\theta}{2}]^{j+m}[(t-1)\cos\frac{\theta}{2}]^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}$$

$$= \sum_{m'}(\sin\theta)^{j+m'}\frac{(t-\cos\theta)^{j-m'}}{\sqrt{(j+m')!(j-m')!}}U^{(j)}_{m,m'}(\theta) \tag{3.7.56}$$

となり，次の結果を得る．

$$U^{(j)}_{m,m'}(\theta) = \sqrt{\frac{(j+m')!}{(j-m')!}}\frac{\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)^{m-m'}\left(\cos\frac{\theta}{2}\right)^{-m-m'}}{2^{j+m'}\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}$$

$$\times\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\cos\theta}\right)^{j-m'}\left[(\cos\theta+1)^{j+m}(\cos\theta-1)^{j-m}\right]. \tag{3.7.57}$$

この式の右辺の分子の部分を

$$\frac{1}{2^{m'}}\left(\sin\frac{\theta}{2}\right)^{m-m'}\left(\cos\frac{\theta}{2}\right)^{-m-m'} = \left(\tan\frac{\theta}{2}\right)^{m}(\sin\theta)^{-m'} \tag{3.7.58}$$

のように書き直すと，$m = 0$ で得られた結果を再現しているのがわかる．また $m' = j$ の場合は元の式の展開から直ちに以下の結果が得られることに注意しよう．

$$U^{(j)}_{m,j}(\theta) = \sqrt{\frac{(2j)!}{(j+m)!(j-m)!}}\left(\cos\frac{\theta}{2}\right)^{j+m}\left(-\sin\frac{\theta}{2}\right)^{j-m}. \tag{3.7.59}$$

2 個の角運動量 $\boldsymbol{J}_1$ と $\boldsymbol{J}_2$ が与えられたとき，全体で角運動量がゼロとなる状態は何だろうか？ 角運動量の合成より，$|j_1 - j_2| \le j$ の条件が付くので，$j = 0$ は $j_1 = j_2$ の場合に限られる($j_1 = j_2 = \frac{1}{2}$ の場合に $j = 0$ が可能であったことはすでに学んだ)．したがって，$j_1 = j_2$ を省いて

$$\langle 0| = \sum_{m_1,m_2}\langle 0|m_1,m_2\rangle\langle m_1,m_2| \tag{3.7.60}$$

と書くと

$$\langle 0|(\boldsymbol{J}_1 + \boldsymbol{J}_2) = 0 \tag{3.7.61}$$

を満たさなければならない．この式の z 成分は

$$\sum_{m_1,m_2} \langle 0|m_1,m_2\rangle(m_1+m_2)\langle m_1,m_2| = 0 \tag{3.7.62}$$

となり

$$m = m_1 + m_2 = 0 \tag{3.7.63}$$

を得る．したがって，簡略化して以下のように書こう．

$$\langle 0| = \sum_m c_m \langle m,-m| \,. \tag{3.7.64}$$

この式の両辺に下降演算子を掛けると

$$\begin{aligned} 0 = \langle 0|(\boldsymbol{J}_{1-}+\boldsymbol{J}_{2-}) &= \sum_m c_m\langle m,-m|(\boldsymbol{J}_{1-}+\boldsymbol{J}_{2-}) \\ &= \sum_m c_m \Big\{ \sqrt{(j_1-m)(j_1+m+1)}\langle m+1,-m| \\ &\qquad + \sqrt{(j_2+m)(j_2-m+1)}\langle m,-m+1| \Big\} \end{aligned} \tag{3.7.65}$$

となる．ここで $j_2=j_1$ だから

$$0 = \sum_m \sqrt{(j_1-m)(j_1+m+1)}(c_m+c_{m+1})\langle m+1,-m| \tag{3.7.66}$$

となり，$c_{m+1}=-c_m$ となる．したがって c_m は m が 1 ずつ変化するたびに符号を変えるので次のようになる．

$$\langle 0| = \sum_{m=-j_1}^{j_1} \frac{1}{\sqrt{2j_1+1}}(-1)^{j_1-m}\langle m,-m| \,. \tag{3.7.67}$$

これはすでに $2j_1+1$ 個の正規化された直交ベクトルの和に対する規格化条件を満たしている．例として $j_1=\frac{1}{2}$ とすると次のようになる．

$$\langle 0| = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\langle +,-| - \langle -,+|\right] \,. \tag{3.7.68}$$

これは，− 符号を除いて式(3.5.12)ですでに得られた結果である．

問題

3-1　$y_+^{\dagger\,\prime}, y_-^{\dagger\,\prime}$ を使った記法を用いて，$\boldsymbol{J}$ の成分を表す微分演算子を求めよ．そして角運動量の適当な固有関数に適用して，$\boldsymbol{J}|j,m\rangle$ に対して知られている結果を導け．

3-2　2 個の角運動量 $j_1=1$ および $j_2=\frac{1}{2}$ がある．全角運動量が $m=j=\frac{3}{2}$ の状態

を個々の状態で表せ．そして $j=\frac{3}{2}$ の他の状態を作れ．次に $m=\frac{1}{2}$, $j=\frac{3}{2}$ の状態と直交するとして $m=j=\frac{1}{2}$ の状態を見出せ．最後に $j=\frac{1}{2}$ の他の状態を作り，これが $m=-\frac{1}{2}$, $j=\frac{3}{2}$ の状態と直交していることを確かめよ．

3-3 2 個の角運動量 $j_1=j_2=1$ から作られる $j=m=2$ の状態は何か？ 次に他の 4 個の $j=2$ の状態を求めよ．$j=1$ および $j=0$ の状態はどのようにして作ることができるか？ すべてを求めよ．

3-4a アイソスピン T：核子はアイソスピン $T=\frac{1}{2}$ の粒子である．$T_3=\frac{1}{2}$ の状態が陽子 (p)で，$T_3=-\frac{1}{2}$ の状態が中性子 (n)である．電荷は $Q=\frac{1}{2}+T_3$ で与えられる．π 中間子(π メソン)はアイソスピンが $T=1$ であり，電荷は $Q=T_3$ である．つまり 3 種類の異なる電荷をもつ π 中間子があり，それぞれ $T_3=1$ (π^+), $T_3=0$ (π^0), $T_3=-1$ (π^-)である．

核子と π 中間子の系を考えよう．この系の電荷は $Q=\frac{1}{2}+T_3$ となる．まず電荷が 2，つまり $T_3=\frac{3}{2}$ の系は $\mathrm{p}+\pi^+$ であることを，アイソスピンから確かめよ．さて，もし系が $T=\frac{3}{2}$, $T_3=\frac{1}{2}$ ならば，陽子を見出す確率はいくらか？ またそのとき付随する π 中間子は何か？ $T=\frac{1}{2}$, $T_3=-\frac{1}{2}$ の系に対して同様の問に答えよ．

3-4b $T=\frac{3}{2}$ である不安定な粒子 Δ は核子 1 個と π 中間子 1 個の $T=\frac{3}{2}$ の状態に崩壊する．Δ^+ が π^+, π^0, π^- を 1 個ずつ生じる割合はいくらか？

3-4c 核子 1 と核子 2 が $T=0$ の状態(この系の電荷は $Q=1+T_3$ である)にあるとする．核子 1 が陽子である確率はいくらか？

3-5 角運動量が $j=1$ の状態は $j=\frac{1}{2}$ の 2 個のスピンの対称な状態として作られる．これら 2 個のスピンの状態を使って，$\boldsymbol{J}$ の成分を角度 θ だけ異なる方向で観測するときの確率 $p(m,m',\theta)$ を求める．$m=m'=\pm1$ および $m=-m'=\pm1$ の場合について計算せよ．次に全確率が 1 となることを使ってすべての他の確率を求めよ．また以上とは独立に $p(0,0,\theta)$ を求めよ．(この問題は 2 個のスピンについての問題であり，一般的な結果の適用ではない)．

3-6a $j=1$ に対して以下のトレースを計算せよ．

$$\mathrm{tr}\,\{J_k\} \qquad (k=x,y,z)\,,$$
$$\mathrm{tr}\,\{J_kJ_l\} \qquad (k,l=x,y,z)\,,$$
$$\mathrm{tr}\,\left\{J_k^2J_l^2\right\} \qquad (k,l=x,y,z)\,.$$

3-6b 観測記号とトレースの式を使って $J_z'=0$ のときに $(J_z\cos\theta+J_x\sin\theta)'=0$ と

なる確率を求めよ．

3-7a　$j=\frac{1}{2}$ に対しては $\boldsymbol{J}$ の直交する直交座標の成分，たとえば，J_x と J_z は相補的である．$j=1$ に対してはそうならないことを示せ．

3-7b　直交しない2つの成分，たとえば J_z と $\boldsymbol{e}\cdot\boldsymbol{J}$（$\boldsymbol{e}$ はある単位ベクトル）ではどうなるか？

3-8a　$\boldsymbol{J}=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_1+\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_2$ として，$\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2$ の固有値はいくらか？ この結果を用いて次の式を直接示せ．

$$(\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2)^2=3-2\boldsymbol{\sigma}_1\cdot\boldsymbol{\sigma}_2\,.$$

そして式(3.5.15)の交換演算子 P_{12} は，$P_{12}^2=1$ となることを示せ．

3-8b　$\boldsymbol{\sigma}_1$ および $\boldsymbol{\sigma}_2$ の代数的性質を使って次の式を示せ．

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma}_1P_{12}&=P_{12}\boldsymbol{\sigma}_2\quad\text{つまり}\quad\boldsymbol{\sigma}_2=P_{12}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_1P_{12}\,,\\ \text{および}\quad\boldsymbol{\sigma}_2P_{12}&=P_{12}\boldsymbol{\sigma}_1\quad\text{つまり}\quad\boldsymbol{\sigma}_1=P_{12}^{-1}\boldsymbol{\sigma}_2P_{12}\,.\end{aligned}$$

式(3.5.16)とはどのような関係か？

3-9　$\boldsymbol{J}=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_1+\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}_2$ に対して，J_x^2，J_y^2，J_z^2 は互いに交換することを示せ．そしてこれらの同時固有ベクトル（ベル*の状態と時には呼ばれる）を σ_{1z} と σ_{2z} の固有ベクトルで表せ．これらと $\boldsymbol{J}^2$ と J_z の固有ベクトルはどのような関係にあるか？

3-10a　系1はある角運動量 $\boldsymbol{J}_1$ を持ち，系2は $\boldsymbol{J}_2=\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$ を持つ．したがって $j=j_1\pm\frac{1}{2}$ が全角運動量 $\boldsymbol{J}=\boldsymbol{J}_1+\boldsymbol{J}_2$ の大きさである．$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{J}_1$ の固有値が次の式で与えられることを示せ．

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{J}_1)'=\begin{cases}j_1 & (j=j_1+\frac{1}{2})\,,\\ -(j_1+1) & (j=j_1-\frac{1}{2})\,.\end{cases}$$

さらに次の式を代数的に証明せよ．

$$(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{J}_1)^2+\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{J}_1-j_1(j_1+1)=(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{J}_1-j_1)(\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{J}_1+j_1+1)=0\,.$$

これより次の式がそれぞれ $j=j_1+\frac{1}{2}$ および $j=j_1-\frac{1}{2}$ の観測記号となることを示せ．

$$\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{J}_1+j_1+1}{2j_1+1}\qquad\text{および}\qquad\frac{j_1-\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{J}_1}{2j_1+1}\,.$$

---

*John Stewart BELL (1928–1990)

3-10b 次の式

$$\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{J}_1 = \sigma_z J_{1z} + \frac{1}{2}(\sigma_x + \mathrm{i}\sigma_y)(J_{1x} - \mathrm{i}J_{1y}) + \frac{1}{2}(\sigma_x - \mathrm{i}\sigma_y)(J_{1x} + \mathrm{i}J_{1y})$$

を使って，次の関係式を示せ．

$$\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{J}_1 + j_1 + 1}{2j_1+1}\left|m_1 = m - \tfrac{1}{2}, m_2 = \tfrac{1}{2}\right\rangle = \left|j = j_1 + \tfrac{1}{2}, m\right\rangle\sqrt{\frac{j_1 + m + \frac{1}{2}}{2j_1+1}}\,,$$

$$\frac{j_1 - \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{J}_1}{2j_1+1}\left|m_1 = m - \tfrac{1}{2}, m_2 = \tfrac{1}{2}\right\rangle = \left|j = j_1 - \tfrac{1}{2}, m\right\rangle\sqrt{\frac{j_1 - m + \frac{1}{2}}{2j_1+1}}\,.$$

これらを使って $\left|j = j_1 + \frac{1}{2}, m\right\rangle$ と $\left|j = j_1 - \frac{1}{2}, m\right\rangle$ の直交性を確かめよ．

3-10c 期待値 $\langle\sigma_z\rangle_{j=j_1\pm\frac{1}{2},m}$ を計算せよ．そして次の射影された演算子の z 成分に対して同じ結果が得られることを示せ．

$$\frac{\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{J}}{\boldsymbol{J}^2}\boldsymbol{J}\,.$$

3-11 式(3.6.1)の $\gamma\boldsymbol{n}$ をオイラー角 ϕ, θ および ψ で表せ．

3-12 以下で現れる有限の回転を記述する 2 個の異なるユニタリー変換を適用して次の式を評価せよ．

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi J_y}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi J_z}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi J_y}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi J_z}\,.$$

同じことを次の式に対しても行え．

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi J_y}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\pi J_z}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi J_y}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\pi J_z}\,.$$

結論は？

3-13 式(3.7.23)において $\left|U^{(j)}_{m,m'}\right|^2$ ではなく $\left[U^{(j)}_{m,m'}\right]^2$ となることを，これらの行列要素が実数であることを示して正当化せよ．

3-14a ゼロベクトル $\boldsymbol{\nu}$ のベクトルとしての性質を利用する議論を使って次の式を示せ．

$$\int \mathrm{d}\Omega\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{\nu}^\dagger\right)^l\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{\nu}\right)^{l'} = \delta_{ll'}\,c_l\left(\boldsymbol{\nu}^\dagger\cdot\boldsymbol{\nu}\right)^l\,.$$

ただしここでは最終的には $\left\langle y_+^{\dagger\,\prime}, y_-^{\dagger\,\prime}\right|\ldots\left|y'_+, y'_-\right\rangle$ に適用するとして，$\boldsymbol{\nu}$ および $\boldsymbol{\nu}^\dagger$ は複素数を成分とするゼロベクトルと見なすことができるとする．そして $\boldsymbol{\nu}$ として具体的に，たとえば $\nu_x = 1$, $\nu_y = \mathrm{i}$, $\nu_z = 0$ として c_l を求めよ．

3-14b　次の式を示せ．

$$\left(\boldsymbol{\nu}^\dagger \cdot \boldsymbol{\nu}\right)^l = 2^l (2l)! \sum_{m=-l}^{l} \frac{\left(y_+^\dagger y_+\right)^{l+m}}{(l+m)!} \frac{\left(y_-^\dagger y_-\right)^{l-m}}{(l-m)!} \ .$$

これと式(3.7.42)から問題3-14aの積分に対して得られる結果とを比較せよ．式(3.7.45)に到達するはずである．

3-15　式(3.7.45)の特別な場合として，以下のルジャンドルの多項式の直交性を確かめよ．

$$\frac{1}{2}\int_{-1}^{1} \mathrm{d}x \, \mathrm{P}_l(x) \mathrm{P}_{l'}(x) = \frac{\delta_{ll'}}{2l+1}$$

また次の式を使って $l, l' = 0, 1, 2$ について具体的に確かめよ．

$$\mathrm{P}_0(x) = 1 \ , \quad \mathrm{P}_1(x) = x \ , \quad \mathrm{P}_2(x) = \tfrac{3}{2}x^2 - \tfrac{1}{2} \ .$$

3-16　次の式を示せ．

$$\int_0^{2\pi} \frac{\mathrm{d}\phi}{2\pi} \left(\frac{\boldsymbol{r}}{r} \cdot \boldsymbol{\nu}\right)^l = \nu_z^l \mathrm{P}_l(\cos\theta) \ .$$

どのような $\boldsymbol{\nu}$ を選択すれば次のルジャンドルの多項式の積分表示が得られるか？

$$\mathrm{P}_l(\cos\theta) = \int_0^{2\pi} \frac{\mathrm{d}\phi}{2\pi} \left(\cos\theta + \mathrm{i}\sin\theta\cos\phi\right)^l \ .$$

これを使って次のよく知られた母関数を導け．

$$\frac{1}{\sqrt{1 - 2xt + t^2}} = \sum_{l=0}^{\infty} t^l \mathrm{P}_l(x) \ .$$

この式はルジャンドルの多項式の別の定義として有用である．

第4章
ガリレイ不変性

4.1 無限小変換の生成演算子

基準系の選択の自由度は回転以外の自由度も含んでいる．空間座標の原点を変位して，定数ベクトルだけ並進することができる．また，並進を時間に比例して増加させることもできる．このとき2つの系は一定速度で相対運動を行っている．ここでは，光速度に比べて小さな相対速度の場合のみを考える(他の状況に関しては問題 4-3 と 4-4 を参照)．すると，時間はその原点を変位する自由度を除いて絶対的な意味を持つ(ガリレイ*・ニュートンの相対性)．したがって，一般的な無限小変換は時空変化

$$\bar{t} = t - \delta t\,,$$

$$\bar{\boldsymbol{r}} = \boldsymbol{r} - \delta\boldsymbol{r}\,,$$

$$\text{ここで}\quad \delta\boldsymbol{r} = \delta\boldsymbol{\epsilon} + \delta\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r} + \delta\boldsymbol{v}\,t \tag{4.1.1}$$

によって表される．ここで δt は定数であり，ベクトル $\delta\boldsymbol{\epsilon}$, $\delta\boldsymbol{\omega}$, $\delta\boldsymbol{v}$ も定数ベクトルである．付随するユニタリー演算子は

$$U = 1 + \mathrm{i}G \tag{4.1.2}$$

$$G = \delta\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{P} + \delta\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{J} + \delta\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{N} - \delta t\,H + \delta\varphi \tag{4.1.3}$$

となる．ここで，位相変換の自由度 φ が常に存在するということを忘れてはならない．生成演算子の名称は以下のように古典力学に由来する．

$\boldsymbol{P}$: 運動量ベクトル，

$\boldsymbol{J}$: 角運動量ベクトル(既出)，

H: エネルギー，ハミルトニアン(または，ハミルトン† 演算子)，

$\boldsymbol{N}$: 古典的名称はないが，おそらく ブースター？

---

*Galileo GALILEI (1564–1642)　†Sir William Rowan HAMILTON (1805–1865)

ここで注意しなければならないことがある．もし$U=1+\mathrm{i}G$と表すならば，明らかにGは無次元である．しかし$\delta\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{P}$は長さ$[L]$と運動量$[ML/T]$の積であるから，その次元は$[ML^2/T]$となる．同様に$-\delta tH$の次元は時間$[T]$にエネルギー$[ML^2/T^2]$を掛けたものであり，また言うまでもなく$\delta\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{J}$の次元は角度(無次元)掛ける角運動量$[ML^2/T]$となり，すべてが作用の次元を持っている．これまでのところ巨視的物理の単位系ではなく自然原子単位を採用してきたことは明らかだろうが，これからは前者の単位系を用いることにする．その代わり次元の変換因子を導入しなければならない．

するとユニタリー演算子は

$$U=1+\mathrm{i}\frac{1}{\hbar}G\,,\quad G=\delta\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{P}+\cdots+\hbar\delta\varphi \tag{4.1.4}$$

と表される．ここで$\hbar$は作用単位であり，プランク*定数hの$(2\pi)^{-1}$倍である．実験によれば

$$\hbar=\frac{h}{2\pi}=1.05457\times10^{-27}\,\mathrm{erg\ sec}=0.658\,212\,\mathrm{eV\ fs} \tag{4.1.5}$$

$(1\,\mathrm{eV}=1.602\,177\times10^{-12}\,\mathrm{erg}$, 電子ボルト;$1\,\mathrm{fs}=10^{-15}\mathrm{s}$, フェムト秒)である．

一般に変換を行う順序は，たとえそれが無限小変換であろうとも重要であるということを認識しなければならない．まず，よく知っている回転を考えることにする．回転の順序を1, 2とする場合の変換

$$\begin{aligned}\boldsymbol{r}\to\boldsymbol{r}-\delta_1\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r}&\to\boldsymbol{r}-\delta_1\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r}-\delta_2\boldsymbol{\omega}\times(\boldsymbol{r}-\delta_1\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r})\\&=\boldsymbol{r}-\delta_1\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r}-\delta_2\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r}+\delta_2\boldsymbol{\omega}\times(\delta_1\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r})\end{aligned} \tag{4.1.6}$$

と，回転の順序を2，1とする場合の変換

$$\boldsymbol{r}\to\boldsymbol{r}-\delta_2\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r}-\delta_1\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r}+\delta_1\boldsymbol{\omega}\times(\delta_2\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r}) \tag{4.1.7}$$

を比較しよう．そこで，回転1, 2を行い，次に回転2，1の逆回転を行う変換は

$$\begin{aligned}\boldsymbol{r}\to\boldsymbol{r}+\delta_2\boldsymbol{\omega}\times(\delta_1\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r})&\underbrace{-\delta_1\boldsymbol{\omega}\times(\delta_2\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r})}_{=\delta_1\boldsymbol{\omega}\times(\boldsymbol{r}\times\delta_2\boldsymbol{\omega})}\\&=\boldsymbol{r}-(\delta_1\boldsymbol{\omega}\times\delta_2\boldsymbol{\omega})\times\boldsymbol{r}\\&=\boldsymbol{r}-\delta_{[12]}\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{r}\end{aligned} \tag{4.1.8}$$

となり，すなわちこの合成回転は角度ベクトル

$$\delta_{[12]}\boldsymbol{\omega}=\delta_1\boldsymbol{\omega}\times\delta_2\boldsymbol{\omega}=-\delta_2\boldsymbol{\omega}\times\delta_1\boldsymbol{\omega} \tag{4.1.9}$$

によって記述される別の回転で表される．

---

*Max Karl Ernst Ludwig PLANCK (1858–1947)

このことはユニタリー変換の観点から見ると，$U_2U_1 \neq U_1U_2$ であり，さらに合成回転は次のユニタリー演算子

$$(U_1U_2)^{-1}U_2U_1 = U_{[12]}\,, \qquad U_{[12]}^{-1} = (U_2U_1)^{-1}U_1U_2 = U_{[21]} \tag{4.1.10}$$

で表されることを意味する．これを無限小変換で表すと

$$U_{[12]} = 1 + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}G_{[12]} = 1 + \frac{1}{\hbar^2}(G_1G_2 - G_2G_1) \tag{4.1.11}$$

すなわち

$$G_{[12]} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[G_1, G_2] \tag{4.1.12}$$

となる．なぜなら各ユニタリー演算子の積を展開すると

$$\begin{aligned} U_2U_1 &= \Big(1 + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}G_2\Big)\Big(1 + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}G_1\Big) \\ &= 1 + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\big(G_2 + G_1\big) - \frac{1}{\hbar^2}G_2G_1 \end{aligned} \tag{4.1.13}$$

および

$$\begin{aligned} U_1U_2 &= \Big(1 + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}G_1\Big)\Big(1 + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}G_2\Big) \\ &= 1 + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\big(G_1 + G_2\big) - \frac{1}{\hbar^2}G_1G_2 \end{aligned} \tag{4.1.14}$$

となるからである．したがって，この合成回転を表す交換関係は

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\delta_1\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{J}, \delta_2\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{J}] = (\delta_1\boldsymbol{\omega}\times\delta_2\boldsymbol{\omega})\cdot\boldsymbol{J} + \hbar\delta_{[12]}\varphi \tag{4.1.15}$$

となる．ここで，スカラー $\delta_{[12]}\varphi$ に対する唯一の可能性は，$\delta_1\boldsymbol{\omega}\cdot\delta_2\boldsymbol{\omega}$ の定数倍となることであるが，これは 1 と 2 について対称であって反対称ではない．それゆえに $\delta_{[12]}\varphi = 0$ である．したがって

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{J}, \delta\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{J}] = \delta\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{J} \tag{4.1.16}$$

を得るが，これはすでに知っているように回転によるベクトルの変換性を示している．

類似の考察によってベクトル量 $\boldsymbol{P}, \boldsymbol{N}, \boldsymbol{J}$ に対しては直ちに

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{P}, \delta\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{J}] = \delta\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{P}\,, \\ &\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{N}, \delta\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{J}] = \delta\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{N} \end{aligned} \tag{4.1.17}$$

が，スカラー H に対しては

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[H, \delta\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{J}] = 0 \tag{4.1.18}$$

が導かれる．

並進についてはどうなるであろうか？ 回転の場合と同様に2つの無限小並進の合成を考えると，

$$\boldsymbol{r} \to \boldsymbol{r} - \delta_1\boldsymbol{\epsilon} \to \boldsymbol{r} - \delta_1\boldsymbol{\epsilon} - \delta_2\boldsymbol{\epsilon} \tag{4.1.19}$$

が示すように

$$\delta_{[12]}\boldsymbol{\epsilon} = 0 \tag{4.1.20}$$

であるから，交換関係は

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\delta_1\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{P}, \delta_2\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{P}] = \hbar\delta_{[12]}\varphi \tag{4.1.21}$$

となる．しかし $\delta_{[12]}\varphi \propto \delta_1\boldsymbol{\epsilon}\cdot\delta_2\boldsymbol{\epsilon}$ だけが可能であるから $\delta_{[12]}\varphi = 0$ であり，

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\delta_1\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{P}, \delta_2\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{P}] = 0 \tag{4.1.22}$$

したがって

$$[P_k, P_l] = 0 \qquad \text{すなわち} \qquad \boldsymbol{P}\times\boldsymbol{P} = 0 \tag{4.1.23}$$

が成り立つことがわかる．同様にして

$$[N_k, N_l] = 0\,, \quad \boldsymbol{N}\times\boldsymbol{N} = 0 \tag{4.1.24}$$

を得る．しかし交換関係（M の次元は質量）

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\delta\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{P}, \delta\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{N}] = \hbar\delta\varphi = M\delta\boldsymbol{\epsilon}\cdot\delta\boldsymbol{v} \tag{4.1.25}$$

においては，今度は $\delta\varphi = 0$ であると結論することはできない．なぜなら，それは2つの異なるベクトルで作られているからである．それゆえ

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[P_k, N_l] = M\delta_{kl} \tag{4.1.26}$$

となる．

時間変位を含む変換に関しては，2つの変換の積が

$$\begin{aligned} t &\to t - \delta_1 t \to t - \delta_1 t - \delta_2 t\,, \\ \boldsymbol{r} &\to \boldsymbol{r} - \delta_1\boldsymbol{v}\,t \to \boldsymbol{r} - \delta_1\boldsymbol{v}\,t - \delta_2\boldsymbol{v}(t - \delta_1 t) \end{aligned} \tag{4.1.27}$$

となるから，$(1,2)\times(2,1)^{-1}$ は正味の変位

$$\delta_{[12]}\boldsymbol{\epsilon} = \delta_1\boldsymbol{v}\,\delta_2 t - \delta_2\boldsymbol{v}\,\delta_1 t \tag{4.1.28}$$

を生成し，交換関係は

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\delta\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{N}, -\delta t\,H] = \delta\boldsymbol{v}\,\delta t\cdot\boldsymbol{P} + \underbrace{\hbar\delta\varphi}_{\to 0} \tag{4.1.29}$$

すなわち

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{N}, H] = -\boldsymbol{P} \tag{4.1.30}$$

となる．一方，並進や回転では合成変換による変位は残らないから

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\delta\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{J}, -\delta t\, H] = 0 \qquad \text{および} \qquad \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\delta\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{P}, -\delta t\, H] = 0 \tag{4.1.31}$$

となり

$$[\boldsymbol{J}, H] = 0 \qquad \text{および} \qquad [\boldsymbol{P}, H] = 0 \tag{4.1.32}$$

を得る．

角運動量ベクトル $\boldsymbol{J}$ を含む交換子は回転への応答を表し，ベクトルとスカラーを区別する．次に並進への応答を表す $\boldsymbol{P}$ との交換子を調べてみよう．まず式(4.1.17)の中の $\boldsymbol{P}$ の方程式から

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{J}, \delta\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{P}] = \delta_{\epsilon}\boldsymbol{J} = \delta\boldsymbol{\epsilon}\times\boldsymbol{P} \tag{4.1.33}$$

を得る．さらに

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{P}, \delta\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{P}] = \delta_{\epsilon}\boldsymbol{P} = 0 \tag{4.1.34}$$

および

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{N}, \delta\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{P}] = \delta_{\epsilon}\boldsymbol{N} = -M\delta\boldsymbol{\epsilon} \tag{4.1.35}$$

そして，もちろん

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[H, \delta\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{P}] = \delta_{\epsilon}H = 0 \tag{4.1.36}$$

などを得る．

このように $\boldsymbol{J}$ と $\boldsymbol{N}$ はともに並進に対してゼロでない応答を示すが，これを表すためにベクトル $\boldsymbol{R}$ を交換関係

$$\delta_{\epsilon}\boldsymbol{R} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{R}, \delta\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{P}] = \delta\boldsymbol{\epsilon}\,,$$

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[R_k, P_l] = \delta_{kl} \tag{4.1.37}$$

を満たす量として導入する．すると

$$\delta_{\epsilon}(\boldsymbol{J} - \boldsymbol{R}\times\boldsymbol{P}) = 0\,, \quad \delta_{\epsilon}(\boldsymbol{N} + M\boldsymbol{R}) = 0 \tag{4.1.38}$$

となるから，角運動量ベクトルを

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{R}\times\boldsymbol{P} + \boldsymbol{S} \tag{4.1.39}$$

と表すと，$\boldsymbol{S}$ の成分は $\boldsymbol{P}$ の成分と交換する．すなわち

$$[S_k, P_l] = 0\ . \tag{4.1.40}$$

また $\boldsymbol{R}$ はベクトルであるから，交換関係

$$\begin{aligned}\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{R}, \delta\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{J}] &= \delta\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{R} \\ &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{R}, \delta\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{P} + \delta\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{S}]\end{aligned} \tag{4.1.41}$$

を満たさなければならないが，これはもし

$$[R_k, R_l] = 0 \qquad \text{すなわち} \quad \boldsymbol{R}\times\boldsymbol{R} = 0 \quad \text{および} \quad [R_k, S_l] = 0 \tag{4.1.42}$$

ならば確かに成り立つ．さらに $\boldsymbol{N}$ は t に比例する変位を生成するから，$\boldsymbol{P}t$ を含まなければならない．そこで

$$\boldsymbol{N} = \boldsymbol{P}t - M\boldsymbol{R} \tag{4.1.43}$$

と表すことができるとしよう．特に $t=0$ では $\boldsymbol{N} = -M\boldsymbol{R}$ であり，$\boldsymbol{N}\times\boldsymbol{N} = 0$ から $\boldsymbol{R}\times\boldsymbol{R} = 0$ が導かれる．

$\boldsymbol{R}$ および $\boldsymbol{P}$ がベクトルであるから，

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{R}\times\boldsymbol{P} \tag{4.1.44}$$

もベクトルであり，交換関係

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{L}, \delta\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{J}] = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{L}, \delta\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{L}] = \delta\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{L} \tag{4.1.45}$$

から

$$\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{L} = \mathrm{i}\hbar\boldsymbol{L} \tag{4.1.46}$$

を得る．このことは

$$\boldsymbol{S}\times\boldsymbol{S} = \mathrm{i}\hbar\boldsymbol{S} \tag{4.1.47}$$

が成り立つことを意味する．そこで角運動量 $\boldsymbol{J}$ は重心の角運動量すなわち軌道角運動量 $\boldsymbol{L}$ と内部角運動量すなわちスピン角運動量 $\boldsymbol{S}$ に分解され

$$\boldsymbol{J} = \boldsymbol{L} + \boldsymbol{S} \tag{4.1.48}$$

となることがわかる．

以上より，系は全体として位置ベクトル $\boldsymbol{R}$，運動量ベクトル $\boldsymbol{P}$ により記述されるという理解に到達した．これらのベクトルの各空間成分は演算子 q, p の組を構成し，交換関係

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[R_k, P_l] = \delta_{kl}\ , \quad [R_k, R_l] = 0\ , \quad [P_k, P_l] = 0 \tag{4.1.49}$$

を満足する．したがって，これらの演算子はどれも連続スペクトルを持ち，古典的極限が存在する．

恒等式

$$\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{L}=\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{R}\times\boldsymbol{P}=\boldsymbol{R}\times\boldsymbol{R}\cdot\boldsymbol{P}=0 \tag{4.1.50}$$

は，$\boldsymbol{R}$ 方向の周りの回転が何の効果も生じないことを意味するが，この量は

$$\delta\langle\ |=\mathrm{i}\langle\ |\delta\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{L}=0 \qquad (\delta\boldsymbol{\omega}\propto\boldsymbol{R}) \tag{4.1.51}$$

より，ゼロの量子数を持つことがわかる．ところでゼロは整数であるから，$\boldsymbol{L}^{2'}=l(l+1)\hbar^2$ での l が取り得る値は負でない整数

$$l=0,1,2,\ldots \tag{4.1.52}$$

である．

次に H についての情報を与える交換関係

$$[\boldsymbol{J},H]=0\,,\qquad [\boldsymbol{P},H]=0\,,\qquad \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{N},H]=-\boldsymbol{P} \tag{4.1.53}$$

に注目しよう．最初の式は H がスカラーであることを示している．2 番目の式は，

$$\langle\boldsymbol{R}'|\boldsymbol{P}=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{R}'}\langle\boldsymbol{R}'| \tag{4.1.54}$$

を用いると（$\boldsymbol{R}$ の各成分は両立する）

$$[\boldsymbol{P},H]=\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{R}}H=0 \tag{4.1.55}$$

となり，H が $\boldsymbol{R}$ に依存していないことを示している．3 番目の式は

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{P}t-M\boldsymbol{R},H]=-\boldsymbol{P} \tag{4.1.56}$$

であり，したがって

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{R},H]=\frac{1}{M}\boldsymbol{P} \tag{4.1.57}$$

となる．しかし（$\boldsymbol{P}$ の各成分も両立する）

$$\langle\boldsymbol{P}'|\boldsymbol{R}=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{P}'}\langle\boldsymbol{P}'| \tag{4.1.58}$$

により，

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{R},H]=\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{P}}H=\frac{1}{M}\boldsymbol{P} \tag{4.1.59}$$

と表される．したがって，

$$H=\frac{\boldsymbol{P}^2}{2M}+H_{\mathrm{int}} \qquad \text{ここで}\quad \boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{P}}H_{\mathrm{int}}=0 \tag{4.1.60}$$

となり，ハミルトニアンは運動エネルギーと内部ハミルトニアンの和に分解されることがわかる．

4.2 素粒子系のハミルトニアン

この節では素粒子を内部エネルギーを持たない粒子，もしくは，少なくとも与えられた状況下では到達できないほど大きな内部エネルギーを持つ粒子と定義する．原子構造の議論においては素粒子とは電子と原子核である．原子核物理の議論においては素粒子とは陽子と中性子である，等々．

各々の素粒子は独立変数 $\boldsymbol{r}_a, \boldsymbol{p}_a, \boldsymbol{s}_a$ および質量 m_a で記述されるとしよう．すると $\boldsymbol{P}, \boldsymbol{J}, \boldsymbol{N}$ は

$$\begin{aligned} \boldsymbol{P} &= \sum_a \boldsymbol{p}_a , \\ \boldsymbol{J} &= \sum_a (\boldsymbol{r}_a \times \boldsymbol{p}_a + \boldsymbol{s}_a) = \boldsymbol{R} \times \boldsymbol{P} + \boldsymbol{S} , \\ \boldsymbol{N} &= \sum_a (\boldsymbol{p}_a t - m_a \boldsymbol{r}_a) = \boldsymbol{P}t - M\boldsymbol{R} \end{aligned} \tag{4.2.1}$$

と加法的に作られる．ここで，全質量と重心の位置ベクトル

$$M = \sum_a m_a , \quad \boldsymbol{R} = \sum_a \frac{m_a}{M} \boldsymbol{r}_a \tag{4.2.2}$$

を用いた．確かに交換関係

$$\begin{aligned} \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[R_k, P_l] &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\sum_a \frac{m_a}{M} \boldsymbol{r}_{ak}, \sum_b \boldsymbol{p}_{bl}\right] \\ &= \underbrace{\sum_a \frac{m_a}{M}}_{=1} \underbrace{\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{r}_{ak}, \boldsymbol{p}_{al}]}_{=\delta_{kl}} = \delta_{kl} \end{aligned} \tag{4.2.3}$$

が成り立つ．角運動量を書き換えて

$$\begin{aligned} \sum_a \boldsymbol{r}_a \times \boldsymbol{p}_a &= \sum_a \Big[\boldsymbol{R} + (\boldsymbol{r}_a - \boldsymbol{R})\Big] \times \boldsymbol{p}_a \\ &= \boldsymbol{R} \times \boldsymbol{P} + \sum_a \underbrace{(\boldsymbol{r}_a - \boldsymbol{R}) \times (\boldsymbol{p}_a - \frac{m_a}{M}\boldsymbol{P})}_{\text{内部変数}} \end{aligned} \tag{4.2.4}$$

と分解できる．ここで

$$\sum_a m_a(\boldsymbol{r}_a - \boldsymbol{R}) = 0 \quad \text{および} \quad \sum_a (\boldsymbol{p}_a - \frac{m_a}{M}\boldsymbol{P}) = 0 \tag{4.2.5}$$

を用いた．この分解により全内部角運動量が

$$\boldsymbol{S} = \sum_a \left[(\boldsymbol{r}_a - \boldsymbol{R}) \times (\boldsymbol{p}_a - \frac{m_a}{M}\boldsymbol{P}) + \boldsymbol{s}_a\right] \tag{4.2.6}$$

と求まった．

もし各構成粒子が互いに孤立しているならば，ハミルトニアンは

$$H = \sum_a \frac{\boldsymbol{p}_a^2}{2m_a} \tag{4.2.7}$$

となる．さらに一般には，

$$H = \sum_a \frac{\boldsymbol{p}_a^2}{2m_a} + V = \frac{\boldsymbol{P}^2}{2M} + H_{\text{int}} \tag{4.2.8}$$

と分解できる．ここで，内部ハミルトニアンは

$$H_{\text{int}} = \sum_a \frac{1}{2m_a}\left(\boldsymbol{p}_a - \frac{m_a}{M}\boldsymbol{P}\right)^2 + V \tag{4.2.9}$$

であり，ポテンシャルエネルギー V は内部変数や $\boldsymbol{s}_a$ および，その他の可能な変数のスカラー関数である．

問題

4-1 具体的な計算により，$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{R} \times \boldsymbol{P}$ は角運動量の交換関係(4.1.46)にしたがうことを示せ．$\boldsymbol{L}$ のベクトル構造に基づいて，$\boldsymbol{L}/\hbar$ の任意の成分が整数値のみを持つという事実に対する理由を考えることができるか？

4-2 $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ は $\boldsymbol{J}, \boldsymbol{L}^2$，および $\boldsymbol{S}^2$ と交換することを示せ．次に $\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{S}$ の固有値を求めよ．

4-3 アインシュタイン*の相対性:式(4.1.1)の第1行目を

$$\bar{t} = t - \frac{1}{c}\delta\epsilon_0 - \frac{1}{c^2}\delta\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{r}$$

で置き換えよ．ここで c は光速度であり，ガリレイ変換は $c \to \infty$ で $(1/c)\delta\epsilon_0 \to \delta t$ とすると考えれば形式的に回復できる．以下の2つの交換関係

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\delta\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{P}, \delta\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{N}\right] = \left(M + \frac{1}{c^2}H\right)\delta\boldsymbol{\epsilon}\cdot\delta\boldsymbol{v}$$

および

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\delta_1\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{N}, \delta_2\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{N}\right] = -\frac{1}{c^2}\delta_1\boldsymbol{v}\times\delta_2\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{J}$$

を例外として，その他の交換関係はガリレイ変換の場合と同じであることを示せ．

4-4 これらの修正された交換関係の結果，$\boldsymbol{R}$ と $\boldsymbol{S}$ を導入する方程式において変更されなければならないものは何か？

---

*Albert EINSTEIN (1879–1955)

4-5　光子は運動方向に沿ってスピン角運動量 $+1$ または -1 のみを持つ(ちなみに，ヘリシティがこの状況下ではスピンよりも適切である)．光線は角度 θ だけ屈折したとする．光子のスピンの性質から，屈折した光線の強度の角度依存性をどの程度まで予期できるか？（ヒント: 問題 3-5 を思い起こせ)．

B. 冬学期：量子動力学

第5章

量子作用原理

5.1 運動方程式

次のように時間の原点を無限小だけ変位させ，

$$\bar{t} = t - \delta t \tag{5.1.1}$$

これに伴う次のユニタリー変換を考えてみよう．

$$U = 1 + \frac{\mathrm{i}}{\hbar} G_t \qquad \text{ただし} \qquad G_t = -\delta t\, H\ . \tag{5.1.2}$$

ここで H はハミルトニアンでその系を記述する変数の組 $v_\alpha(t)$，および時間 t そのものにも依存する可能性もあるとする．ここで時間の原点を動かしたため，変数は次のように再定義する．

$$v_\alpha(t) = \bar{v}_\alpha(\bar{t})\ . \tag{5.1.3}$$

すると，

$$\begin{aligned} \bar{v}_\alpha(t) &= v_\alpha(t + \delta t) = v_\alpha(t) + \delta t \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} v_\alpha(t) \\ &\equiv v_\alpha(t) - \delta v_\alpha(t) \end{aligned} \tag{5.1.4}$$

となり，ここで

$$\delta v_\alpha(t) = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[v_\alpha(t), G_t] \tag{5.1.5}$$

を使うと以下のようになる．

$$-\delta t \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} v_\alpha(t) = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[v_\alpha(t), -\delta t\, H]\ . \tag{5.1.6}$$

これより次の運動方程式を得る．

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} v_\alpha(t) = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[v_\alpha(t), H]\ . \tag{5.1.7}$$

より一般的に，すべての $v_\alpha(t)$ をまとめて $v(t)$ と書き，関数 $F\big(v(t),t\big)$ について考えよう．変換は以下のようになり，

$$U^{-1}FU = F - \delta F = F\big(U^{-1}v(t)U, t\big) \\ = F\big(\overline{v}(t), t\big) = F\big(v(t+\delta t), t\big) \tag{5.1.8}$$

右辺は次のように書ける．

$$F\big(v(t+\delta t), t\big) = F\big(v(t), t\big) + \delta t \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} - \frac{\partial}{\partial t}\right) F\big(v(t), t\big)\,. \tag{5.1.9}$$

ここで $\mathrm{d}/\mathrm{d}t$ は全時間微分で，$\partial/\partial t$ はあらわな（またはパラメトリックな）t 依存性の微分である．したがって $\mathrm{d}/\mathrm{d}t - \partial/\partial t$ は力学変数 $v(t)$ を通した陰な時間依存性についての微分を表す．以上より

$$\delta F = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[F, -\delta t\, H] = -\delta t \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} - \frac{\partial}{\partial t}\right) F \tag{5.1.10}$$

が得られ，これを次の形に書いたものが，ハイゼンベルクの運動方程式である．

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}F = \frac{\partial}{\partial t}F + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[F, H]\,. \tag{5.1.11}$$

この式より，ある演算子 F の時間変化に対しては2つの寄与があることがわかる．1つはあらわな時間依存性で $\partial F/\partial t$ の項であり，もう1つはハミルトニアンと演算子 F の交換関係に $(\mathrm{i}\hbar)^{-1}$ を掛けた，力学的な時間依存項である．

v に対する運動方程式(5.1.7)は，もちろん上記の方程式に含まれる．なぜなら，力学変数はもともとあらわな時間依存性を持っていないので $\partial v/\partial t = 0$ となるからである．

ベクトル $\langle \ldots, t|$（省略記号 ... は時間に依存しない量子数の組を表す）に対する変化は次のように書け，

$$\overline{\langle \ldots, t|} = \langle \ldots, t| \left(1 + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}G_t\right) = \langle \ldots, t| - \delta\langle \ldots, t| \tag{5.1.12}$$

変化量は以下のようになる．

$$\delta\langle \ldots, t| = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\langle \ldots, t|G_t = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle \ldots, t|\delta t\, H\,. \tag{5.1.13}$$

$\langle \ldots, t|$ についてもう少し明確に書こう．まず力学変数 $v(t)$ の中から互いに交換する演算子の完全な組 $v_{c\alpha}(t)$ を選び，時刻 t においてある値をとるとして，それをまとめて v'_c と書く．

$$\langle v'_c, t|v_{c\alpha}(t) = v'_{c\alpha}\langle v'_c, t|\,. \tag{5.1.14}$$

この方程式にユニタリー演算子(5.1.2)を掛けると，次のようになる．

$$\overline{\langle v'_c, t|}\,\underbrace{\overline{v}_{c\alpha}(t)}_{=v_{c\alpha}(t+\delta t)} = v'_{c\alpha}\overline{\langle v'_c, t|}\,. \tag{5.1.15}$$

つまり $\overline{\langle v_c', t|}$ は，演算子 $v_{c\alpha}(t+\delta t)$ の左固有ベクトルで，固有値は $v_{c\alpha}'$ である．ここで

$$\overline{\langle v_c', t|} = \langle v_c', t+\delta t| = \langle v_c', t| + \underbrace{\delta t \frac{\partial}{\partial t}\langle v_c', t|}_{= -\delta\langle v_c', t|} \tag{5.1.16}$$

より

$$-\delta t \frac{\partial}{\partial t}\langle v_c', t| = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle v_c', t|H\bigl(v(t), t\bigr)\delta t \tag{5.1.17}$$

となり，以下の方程式が得られる．

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle v_c', t| = \langle v_c', t|H\ . \tag{5.1.18}$$

これがシュレーディンガーの微分形の運動方程式である．このエルミート共役は次のようになる．

$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}|v_c', t\rangle = H|v_c', t\rangle\ . \tag{5.1.19}$$

これらの運動方程式をまとめると，次の結果が得られる．

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}&\langle v_c', t|F\bigl(v(t), t\bigr)|v_c'', t\rangle \\ &= \langle v_c', t|\left(\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}HF + \frac{\partial}{\partial t}F + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[F, H] - \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}FH\right)|v_c'', t\rangle \\ &= \langle v_c', t|\frac{\partial F}{\partial t}\bigl(v(t), t\bigr)|v_c'', t\rangle\ .\end{aligned} \tag{5.1.20}$$

もし F があらわに時間 t に依存しなければ，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle v_c', t|F\bigl(v(t)\bigr)|v_c'', t\rangle = 0 \tag{5.1.21}$$

となり，時間 t の変化を表すユニタリー変換を演算子と状態ベクトルに演算したときは $\langle v_c', t|F|v_c'', t\rangle$ は変化しない．

5.2 保存則

式(5.1.11)の演算子に対するハイゼンベルクの運動方程式から得られるいくつかの一般的な結果について考察しよう．まず初めに $F = H$ とすると，

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial t} + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[H, H] = \frac{\partial H}{\partial t} \tag{5.2.1}$$

となる．特に，もし H があらわに時間に依存せず $\partial H/\partial t = 0$ である，つまり時間の変位に対して H が形を変えないならば

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} = 0 \tag{5.2.2}$$

となる．これはエネルギーの保存を表している．つまり H は運動の恒量である．

次に $F=\delta\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{P}$ としてみよう．

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\delta\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{P}=-\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[H,\delta\boldsymbol{\epsilon}\cdot\boldsymbol{P}]=-\delta_{\boldsymbol{\epsilon}}H\ . \tag{5.2.3}$$

ここで $\delta_{\boldsymbol{\epsilon}}H$ は座標の変位による H の変化量である．もし H が座標の変位に対して不変である，つまり4.2節で現れた相対座標(内部座標) $\boldsymbol{r}_a-\boldsymbol{R}$ のみに依存するならば，

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{P}=0 \tag{5.2.4}$$

となり，運動量は保存される．同様に $F=\delta\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{J}$ とすると

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\delta\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{J}=-\delta_{\boldsymbol{\omega}}H \tag{5.2.5}$$

となる．もし H が無限小回転で不変ならば，つまりスカラーならば角運動量が保存される．

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{J}=0\ . \tag{5.2.6}$$

最後に $F=\delta\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{N}=\delta\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{P}t-\delta\boldsymbol{v}\cdot M\boldsymbol{R}$ について考えてみよう．

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\delta\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{N}&=\frac{\partial}{\partial t}(\delta\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{P}t)+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\delta\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{N},H]\\&=\delta\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{P}-\delta_{\boldsymbol{v}}H\ .\end{aligned} \tag{5.2.7}$$

ここでハミルトニアンが式(4.2.8)のように，$H=\boldsymbol{P}^2/(2M)+H_{\mathrm{int}}$ だとしよう．ただし H_{int} は内部座標のみに依存する相互作用で，したがってこの変位に対しては不変である．すると予想通り

$$\delta_{\boldsymbol{v}}\boldsymbol{P}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{P},-\delta\boldsymbol{v}\cdot M\boldsymbol{R}]=\delta\boldsymbol{v}\,M \tag{5.2.8}$$

を使って

$$\delta_{\boldsymbol{v}}H=\frac{\boldsymbol{P}}{M}\cdot M\delta\boldsymbol{v}=\delta\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{P} \tag{5.2.9}$$

となる．したがって以下の結果を得る．

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{N}=0\ . \tag{5.2.10}$$

これの解釈は明らかであろう．運動量の保存則を使うと次の式より系は一定速度 $\boldsymbol{P}/M$ で運動していることがわかる．

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{N}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{P}t-M\boldsymbol{R})=\boldsymbol{P}-M\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{R}=0\ . \tag{5.2.11}$$

これら個々の結果は，すべてが等価な座標系の間のユニタリー変換と関係していることを認識すれば，以下のようにまとめることができる．ある物理的な状態 $|\ \rangle$ につ

いて考えよう．この状態は波動関数 $\langle v_c', t|\ \rangle$ によって記述される．同じ状態を別の座標系で

$$\overline{\langle v_c', t|}\ \rangle = \langle v_c', t|U(t)|\ \rangle \tag{5.2.12}$$

のように記述することもできる．これはもとの座標系での，異なる物理的な状態 $U(t)|\ \rangle$ の記述でもある．両方の状態はシュレーディンガーの運動方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle v_c', t|\ \rangle = \langle v_c', t|H|\ \rangle \tag{5.2.13}$$

および

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle v_c', t|U(t)|\ \rangle = \langle v_c', t|HU(t)|\ \rangle \tag{5.2.14}$$

を満たさなければならない．ここで

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Big(\langle v_c', t|U(t)\Big) = \langle v_c', t|HU(t) + \mathrm{i}\hbar\langle v_c', t|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U \tag{5.2.15}$$

と見比べると，方程式が成り立つのは次の式が成り立つときのみであることがわかる．

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}U(t) = 0\ . \tag{5.2.16}$$

したがって，$U = 1 + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}G$ とすると

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}G = 0 \tag{5.2.17}$$

となる．これが H, $\boldsymbol{P}$,$\boldsymbol{J}$, $\boldsymbol{N}$ に関する保存則の基本原理である．

5.3　q,p 対変数の組

$\boldsymbol{R}$ と $\boldsymbol{P}$ に対しての交換関係は以下の通りである．

$$[R_k, R_l] = 0\ ,\quad [P_k, P_l] = 0\ ,\quad \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[R_k, P_l] = \delta_{kl} \qquad (k, l = 1, 2, 3)\ . \tag{5.3.1}$$

そして，より一般的に $\boldsymbol{r}_a$ と $\boldsymbol{p}_a$ に対しては

$$[r_{ka}, r_{lb}] = 0\ ,\quad [p_{ka}, p_{lb}] = 0\ ,\quad \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[r_{ka}, p_{lb}] = \delta_{ab}\delta_{kl} \tag{5.3.2}$$

となる．一般に，独立な q,p 対に対して交換関係は

$$[q_\alpha, q_\beta] = 0\ ,\quad [p_\alpha, p_\beta] = 0\ ,\quad \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[q_\alpha, p_\beta] = \delta_{\alpha\beta} \tag{5.3.3}$$

となる．さらに粒子のスピン $\boldsymbol{s}_a$ や角運動量も(式(3.4.10)および(3.4.21)を参照)

$$\boldsymbol{s} = y^\dagger\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}y = \sum_{\sigma,\sigma'} y_\sigma^\dagger\langle\sigma|\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}|\sigma'\rangle y_{\sigma'} \tag{5.3.4}$$

のように表すことができ，各 $y, y^\dagger$ 対は次のようにエルミートな q, p 対で書ける．

$$y = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(q + \frac{\mathrm{i}}{\hbar}p\right), \quad y^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(q - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}p\right). \tag{5.3.5}$$

この y, $\mathrm{i}\hbar y^\dagger$ を，以下のように非エルミートな対として扱うこともできる．

$$\left[y_{\sigma a}, y_{\sigma' b}\right] = 0, \quad \left[\mathrm{i}\hbar y^\dagger_{\sigma a}, \mathrm{i}\hbar y^\dagger_{\sigma' b}\right] = 0, \quad \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[y_{\sigma a}, \mathrm{i}\hbar y^\dagger_{\sigma' b}\right] = \delta_{ab}\delta_{\sigma\sigma'}. \tag{5.3.6}$$

そこで非常に一般的に，q, p 変数の組と，これらの組の関数であるハミルトニアン $H(q, p, t)$ を考えよう．ここで問題 1-54，1-55 および 1-56 で学んだことを思い出し，それらを直ちに次のように q, p 対の組に拡張しよう．

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[q_\alpha, F] = \frac{\partial F}{\partial p_\alpha}, \qquad \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[F, p_\beta] = \frac{\partial F}{\partial q_\beta}. \tag{5.3.7}$$

式(5.3.3)の基本的な交換関係は上記の関係式の特別な場合である．そして，この関係を使うと $q_\alpha(t)$ と $p_\alpha(t)$ に対する運動方程式は次のようになる．

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}q_\alpha &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[q_\alpha, H] = \frac{\partial H}{\partial p_\alpha}, \\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}p_\alpha &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[p_\alpha, H] = -\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}.\end{aligned} \tag{5.3.8}$$

これより古典的なハミルトンの運動方程式の起源が理解できる．これらは基本的な量子レベルにおいてもすでに正しいのである．

次に記号的なシュレーディンガー方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle v'_c, t|\ \rangle = \langle v'_c, t|H|\ \rangle \tag{5.3.9}$$

をより具体的な形に書き表してみよう．ある時刻 t で互いに交換する演算子の組の完全系として $q_\alpha(t)$（これが最も普通なのだが）を採ろう．どんな $p_\beta(t)$ も，この組の演算子のどれか（もちろん q_β なのだが）とは交換しない．すると上記の式は次の波動関数に対する運動方程式となる．

$$\langle q', t|\ \rangle \equiv \psi(q', t). \tag{5.3.10}$$

ここで，もう一度次の1個の q, p 対（1自由度）に対する式 (1.16.19)

$$\langle q'|\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}pq''} = \langle q' + q''| \tag{5.3.11}$$

を思い出し，$q'' \to \delta q$ として，任意の対の数に拡張すると

$$\langle q'|\frac{\mathrm{i}}{\hbar}G_q = \langle q'|\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_\alpha p_\alpha \delta q_\alpha = \sum_\alpha \delta q_\alpha \frac{\partial}{\partial q'_\alpha}\langle q'| \tag{5.3.12}$$

となる．または式(1.16.29)のように

$$\langle q', t|p_\alpha(t) = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial q'_\alpha}\langle q', t| \tag{5.3.13}$$

の形に書くと，すべての演算子やベクトルが1つの共通の時間 t に対応していることは明らかであろう．以前と同様に（式(1.16.34)を参照），F が p に代数的に依存する場合は以下のように一般化できる．

$$\langle q', t|F\big(q(t), p(t)\big) = F\left(q', \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial q'}\right)\langle q', t| \,. \tag{5.3.14}$$

これをハミルトニアンに適用すると，次の波動関数に対する微分方程式を得る．

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(q', t) = H\left(q', \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial q'}, t\right)\psi(q', t) \,. \tag{5.3.15}$$

これが q を変数とする波動関数に対する，微分形のシュレーディンガーの運動方程式である．通常はこれを単にシュレーディンガー方程式と呼ぶ．

同様に $(q \to p, p \to -q)$ とすることで，p を変数とする波動関数に対するシュレーディンガー方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(p', t) = H\left(\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial p'}, p', t\right)\psi(p', t) \tag{5.3.16}$$

を得る．この方程式は $H(q, p, t)$ が代数的に q に依存している場合にのみ有用である．しかし，一方の波動関数から他方を求めることは常に可能である．1自由度の場合の qp 変換の関数

$$\langle q'|p'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}q'p'} \,. \tag{5.3.17}$$

を思い出して欲しい（式(2.1.17)を参照）．ここで係数 $1/\sqrt{\hbar}$ が適切であることは以下の式からわかる．

$$\begin{aligned}\int \langle q'|p'\rangle\,\mathrm{d}p'\,\langle p'|q''\rangle &= \delta(q' - q'') \\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p'}{2\pi\hbar}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(p'/\hbar)(q' - q'')} \,.\end{aligned} \tag{5.3.18}$$

これは式(2.1.18)の p' を $p'/\hbar$ に置き換えて見れば正しいことがわかる．

n 自由度に対しては以下のように書ける．

$$\begin{aligned}\langle q'|p'\rangle &= \Big(\langle q_1'|\cdots\langle q_n'|\Big)\Big(|p_1'\rangle\cdots|p_n'\rangle\Big) \\ &= \prod_\alpha \langle q_\alpha'|p_\alpha'\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n/2}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_\alpha q_\alpha' p_\alpha'} \,.\end{aligned} \tag{5.3.19}$$

これはたとえば次の式を満たす．

$$\int \langle q'|p'\rangle \underbrace{(\mathrm{d}p')}_{\equiv \mathrm{d}p_1'\cdots\mathrm{d}p_n'} \langle p'|q''\rangle = \prod_\alpha \underbrace{\int \langle q_\alpha'|p_\alpha'\rangle\,\mathrm{d}p_\alpha'\,\langle p_\alpha'|q_\alpha''\rangle}_{=\delta(q_\alpha' - q_\alpha'')} \equiv \delta(q' - q'') \,. \tag{5.3.20}$$

したがって変換は

$$\langle q', t|\;\rangle = \int \langle q'|p'\rangle\,(\mathrm{d}p')\,\langle p', t|\;\rangle \tag{5.3.21}$$

となる．これを波動関数の形で書くと

$$\psi(q',t) = \int \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n/2}}\, \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_\alpha q'_\alpha p'_\alpha}\, (\mathrm{d}p')\, \psi(p',t) \tag{5.3.22}$$

および

$$\psi(p',t) = \int \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n/2}}\, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_\alpha p'_\alpha q'_\alpha}\, (\mathrm{d}q')\, \psi(q',t) \tag{5.3.23}$$

と書ける．

5.4　自由粒子の運動の波動関数

最も簡単な例として，質量が M の 1 粒子の運動（または，多粒子系でも内部の運動には言及しない場合）について考えよう．

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2M}\ . \tag{5.4.1}$$

ここで

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{r}} = 0 \tag{5.4.2}$$

より，$\boldsymbol{p}$ は時間変化に対して一定である．したがって $\boldsymbol{p}$ のいろいろな固有状態 $|\boldsymbol{p}''\rangle$ について考えてみよう．この場合は $\boldsymbol{p}$ を変数とする波動関数

$$\langle \boldsymbol{p}',t|\boldsymbol{p}''\rangle \equiv \psi_{\boldsymbol{p}''}(\boldsymbol{p}',t) \tag{5.4.3}$$

は簡単に求めることができる．ただし $|\boldsymbol{p}''\rangle$ は $t=0$ の状態である．式(5.3.16)のシュレーディンガー方程式は

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi_{\boldsymbol{p}''}(\boldsymbol{p}',t) = \underbrace{\frac{\boldsymbol{p}'^2}{2M}}_{=E(\boldsymbol{p}')}\psi_{\boldsymbol{p}''}(\boldsymbol{p}',t) \tag{5.4.4}$$

となり，解は以下のようになる．

$$\psi_{\boldsymbol{p}''}(\boldsymbol{p}',t) = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E(\boldsymbol{p}')t}\delta(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}'')\ . \tag{5.4.5}$$

これは次のように初期条件を満たしており，

$$\psi_{\boldsymbol{p}''}(\boldsymbol{p}',0) = \langle \boldsymbol{p}'|\boldsymbol{p}''\rangle = \delta(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}'') \tag{5.4.6}$$

明らかに運動量 $\boldsymbol{p}$ を測定すると常に $\boldsymbol{p}''$ となり，粒子は決まったエネルギー $E(\boldsymbol{p}') = E(\boldsymbol{p}'')$ を持っている．

さて次に $\boldsymbol{r}'$ を変数とする波動関数を求めよう（式(5.3.22)において自由度を $n=3$ にすればよい）．

$$\psi_{\boldsymbol{p}''}(\boldsymbol{r}',t) = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}} \int \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{r}'\cdot\boldsymbol{p}'}\,(\mathrm{d}\boldsymbol{p}')\,\delta(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}'')\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E(\boldsymbol{p}')t}$$
$$= \frac{1}{(2\pi\hbar)^{3/2}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\boldsymbol{p}''\cdot\boldsymbol{r}' - E(\boldsymbol{p}'')t]}\,. \tag{5.4.7}$$

ここで現れた平面波の標準的な記法は

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r} - \omega t)} \tag{5.4.8}$$

であり，通常 $\boldsymbol{k}$ を伝播ベクトルまたは波数ベクトルと呼び，ω は角振動数と呼ばれる．これらは波長 λ および振動数 ν と次の関係にある．

$$|\boldsymbol{k}| = \frac{2\pi}{\lambda} = \frac{1}{\bar{\lambda}}\,, \qquad \omega = 2\pi\nu\,. \tag{5.4.9}$$

また $\bar{\lambda} \equiv \lambda/(2\pi)$ は還元波長，波長の逆数 $\lambda^{-1} = |\boldsymbol{k}|/(2\pi)$ は波数，そして $|\boldsymbol{k}|$ は還元波数と呼ばれる．これより次のような($'$ は省略して記す)プランクのエネルギーと振動数の関係式

$$E = h\nu = \hbar\omega \tag{5.4.10}$$

およびド・ブロイの運動量と波長の関係式が得られる．

$$\boldsymbol{p} = \hbar\boldsymbol{k}\,, \qquad |\boldsymbol{p}| = \frac{h}{\lambda} = \frac{\hbar}{\bar{\lambda}}\,. \tag{5.4.11}$$

もちろん式(5.4.7)の波動関数は式(5.3.15)のシュレーディンガー方程式

$$\underbrace{\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}}_{\to E}\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r},t) = \underbrace{\frac{1}{2M}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\boldsymbol{\nabla}\right)^2}_{\to \boldsymbol{p}^2/(2M)}\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r},t) \tag{5.4.12}$$

にしたがい，この方程式から直接解を導くことも可能である．さて，それではここでこの簡単な系での次のもう 1 つの波動関数を探してみよう．

$$\langle\boldsymbol{r}',t|\boldsymbol{r}''\rangle \equiv \langle\boldsymbol{r}',t|\boldsymbol{r}'',t=0\rangle\,. \tag{5.4.13}$$

これは以下のようにして求めることができる．

$$\langle\boldsymbol{r}',t|\boldsymbol{r}''\rangle = \int \langle\boldsymbol{r}',t|\boldsymbol{p}'\rangle\,(\mathrm{d}\boldsymbol{p}')\,\langle\boldsymbol{p}'|\boldsymbol{r}''\rangle$$
$$= \int \frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{p}')}{(2\pi\hbar)^3}\,\underbrace{\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{r}'\cdot\boldsymbol{p}'}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}[\boldsymbol{p}'^2/(2M)]t}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}'\cdot\boldsymbol{r}''}}_{=\exp\left(\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}'\cdot(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}'') - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{t}{2M}\boldsymbol{p}'^2\right)}$$
$$= \int \frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{p}')}{(2\pi\hbar)^3}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{t}{2M}[\boldsymbol{p}' - (M/t)(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}'')]^2}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{M}{2t}(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}'')^2}$$
$$= \left(\frac{M}{2\pi\mathrm{i}\hbar t}\right)^{\frac{3}{2}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{M}{2t}(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}'')^2}\,. \tag{5.4.14}$$

この時間変換関数は概念的には重要であるが，波動関数として直接物理的な解釈をするには理想化されすぎている．さて，今後の議論を進めていくために，今までのことは

$$H = \frac{p_x^2}{2M} + \frac{p_y^2}{2M} + \frac{p_z^2}{2M} \tag{5.4.15}$$

からわかるように，x, y および z の運動が独立であることに注目しよう．たとえば前述の式も

$$\langle \boldsymbol{r}', t | \boldsymbol{r}'' \rangle = \prod_{j=1}^{3} \sqrt{\frac{M}{2\pi \mathrm{i} \hbar t}}\, \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \frac{M}{2t} (x_j' - x_j'')^2} \tag{5.4.16}$$

のように書ける．したがってこれからは $x_1 \equiv x$，$p_1 = p_x \equiv p$ とした，1次元の運動について考えよう．

仮に $t = 0$ で状態が不確定性を最小にする，つまり $\langle x \rangle = x_0$, $\langle p \rangle = p_0$ でそして $\delta x \delta p = \frac{1}{2}\hbar$ となる $|\delta\rangle$ であったとしよう．式(2.3.6)および(2.3.7)より，初期状態の波動関数は以下のようなガウス型になる．

$$\begin{aligned}
\langle x, t=0 | \delta \rangle = \psi_\delta(x) &= \frac{(2\pi)^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{\delta x}}\, \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} p_0 (x - x_0)}\, \mathrm{e}^{-(\frac{x - x_0}{2\delta x})^2}\, \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2\hbar} x_0 p_0} \\
&= \frac{(2/\pi)^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{\hbar/\delta p}}\, \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} p_0 (x - x_0)}\, \mathrm{e}^{-[\frac{1}{\hbar}(x - x_0)\delta p]^2}\, \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2\hbar} x_0 p_0} \\
&= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} x p}\, \mathrm{d}p\, \psi_\delta(p)\ .
\end{aligned} \tag{5.4.17}$$

そして，$x \to p, p \to -x$ とすることで，p を変数とする波動関数は以下のようになる．

$$\begin{aligned}
\langle p, t=0 | \delta \rangle = \psi_\delta(p) &= \frac{(2\pi)^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{\delta p}}\, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} x_0 (p - p_0)}\, \mathrm{e}^{-(\frac{p - p_0}{2\delta p})^2}\, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2\hbar} p_0 x_0} \\
&= \frac{(2/\pi)^{\frac{1}{4}}}{\sqrt{\hbar/\delta x}}\, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} x_0 (p - p_0)}\, \mathrm{e}^{-[\frac{1}{\hbar}(p - p_0)\delta x]^2}\, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2\hbar} p_0 x_0}\ .
\end{aligned} \tag{5.4.18}$$

この波動関数の時間依存性は

$$\psi_\delta(p, t) = \langle p, t | \delta \rangle = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} E(p) t} \psi_\delta(p) \tag{5.4.19}$$

となることは明らかであろう．これより x を変数とする波動関数は次のように書ける．

$$\begin{aligned}
\psi_\delta(x, t) = \langle x, t | \delta \rangle &= \int \langle x | p \rangle\, \mathrm{d}p\, \langle p, t | \delta \rangle \\
&= \int \frac{\mathrm{d}p}{\sqrt{2\pi\hbar}} \frac{(2\pi)^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{\delta p}}\, \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} p (x - x_0)}\, \mathrm{e}^{-[\frac{1}{\hbar}(p - p_0)\delta x]^2}\, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \frac{p^2}{2M} t}\, \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2\hbar} x_0 p_0}\ .
\end{aligned} \tag{5.4.20}$$

被積分関数の指数部分は p の2次式で，p^2 の項は

$$-\left(\frac{p\delta x}{\hbar}\right)^2 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \frac{p^2}{2M} t = -\frac{1}{\varepsilon(t)} \left(\frac{p\delta x}{\hbar}\right)^2 \tag{5.4.21}$$

で与えられる．ただし

$$\frac{1}{\varepsilon(t)}=1+\mathrm{i}\frac{\hbar t}{2M(\delta x)^2}=1+\mathrm{i}\frac{t}{M}\frac{\delta p}{\delta x}=1+2\mathrm{i}\frac{t(\delta p)^2}{\hbar M} \tag{5.4.22}$$

である．これを書き直すと

$$\varepsilon(t)=1-\mathrm{i}\frac{t}{M}\frac{\delta p}{\delta x}\varepsilon(t) \tag{5.4.23}$$

となり，これは式(5.4.20)の指数部分を

$$\begin{aligned}\text{指数部分}=&-\frac{1}{\varepsilon(t)}\left[\frac{p-\varepsilon(t)p_0}{\hbar/\delta x}-\frac{\mathrm{i}}{2}\varepsilon(t)\frac{x-x_0}{\delta x}\right]^2\\&+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_0(x-x_0)-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p_0^2}{2M}t-\varepsilon(t)\left(\frac{x-x_0-p_0t/M}{2\delta x}\right)^2\\&+\frac{\mathrm{i}}{2\hbar}x_0p_0\end{aligned} \tag{5.4.24}$$

のように平方の形に変形するときに役に立つ．このようにすると，p についての積分は簡単に実行できて次の結果を得る．

$$\begin{aligned}\psi_\delta(x,t)&=\frac{(2\pi)^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{\delta x/\varepsilon(t)}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_0(x-x_0)}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p_0^2}{2M}t}\,\mathrm{e}^{-\varepsilon(t)\left(\frac{x-x_0-p_0t/M}{2\delta x}\right)^2}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2\hbar}x_0p_0}\\&=(2/\pi)^{\frac{1}{4}}\left[\varepsilon(t)\delta p/\hbar\right]^{\frac{1}{2}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p_0(x-x_0)}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p_0^2}{2M}t}\\&\qquad\times\,\mathrm{e}^{-\varepsilon(t)[\frac{1}{\hbar}(x-x_0-p_0t/M)\delta p]^2}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2\hbar}x_0p_0}\,.\end{aligned} \tag{5.4.25}$$

これより確率分布は以下のようになる．

$$|\psi_\delta(x,t)|^2=\frac{(2\pi)^{-\frac{1}{2}}}{\delta x(t)}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\left(\frac{x-\langle x(t)\rangle}{\delta x(t)}\right)^2}\,. \tag{5.4.26}$$

ここで $\mathrm{Re}\,\varepsilon(t)=|\varepsilon(t)|^2$ を使った．この分布は常にガウス型で，もちろん以下のように規格化されている．

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\,|\psi_\delta(x,t)|^2=1\,. \tag{5.4.27}$$

平均の位置は

$$\langle x(t)\rangle=x_0+\frac{p_0}{M}t \tag{5.4.28}$$

となり，時間に比例して増加しており，粒子が一定の速度 p_0/M で動いていることがわかる．位置の広がりは時間 t に依存して

$$\delta x(t)=|\varepsilon(t)|^{-1}\delta x=\sqrt{(\delta x)^2+(t\delta p/M)^2} \tag{5.4.29}$$

となり，式(5.4.26)のガウス分布が時間とともに広がっていることを示している．運動量の広がりは時間に依存しない．

$$\delta p(t)=\delta p\,. \tag{5.4.30}$$

これはもちろん次の式より明らかである.

$$|\psi_\delta(p,t)|^2 = |\psi_\delta(p)|^2 . \tag{5.4.31}$$

これより不確定さの積は

$$\big[\delta x(t)\,\delta p(t)\big]^2 = \left(\frac{1}{2}\hbar\right)^2 |\varepsilon|^{-2} = \left(\frac{1}{2}\hbar\right)^2 + \left(\frac{(\delta p)^2}{M}t\right)^2 \tag{5.4.32}$$

となり，時間とともに増加し，やがて時間に比例するようになる.

$$\delta x(t)\,\delta p(t) \cong \frac{(\delta p)^2 t}{M} \qquad \text{もし} \quad \frac{(\delta p)^2}{M}t \gg \hbar . \tag{5.4.33}$$

ここで，$t \geq 0$ となるいかなる時刻においても，$\delta x(t)$ に対する最小値が存在することにも注意しよう.

$$\begin{aligned}\big[\delta x(t)\big]^2 &= (\delta x)^2 + \frac{1}{(\delta x)^2}\left(\frac{\hbar t}{2M}\right)^2 \\ &= \left(\delta x - \frac{1}{\delta x}\frac{\hbar t}{2M}\right)^2 + \frac{\hbar t}{M} \geq \frac{\hbar t}{M} .\end{aligned} \tag{5.4.34}$$

$\delta x(t)$ は時刻 $t = T$ において，もし $(\delta x)^2 = \frac{1}{2}\hbar T/M$ となる，つまり $\delta x/\delta p = T/M$ となるとき最小値をとる．そしてこの最適の状況では $\big[\delta x(t)\big]^2$ は時刻 T でちょうど2倍となる．当然のことながら，この時間定数は式(5.4.22)の $\varepsilon(t)$ にも現れている.

$$\varepsilon = (1 + \mathrm{i}t/T)^{-1} \qquad \text{ただし} \quad T = M\frac{\delta x}{\delta p} . \tag{5.4.35}$$

そして $\delta x(t)$ も

$$\delta x(t)/\delta x = \sqrt{1 + (t/T)^2} \geq \sqrt{2t/T} \tag{5.4.36}$$

のように書け，これより T が式(5.4.26)のガウス型の確率分布の広がりに対する時間のスケールを与えていることがわかる．下限は式(5.4.34)であり，そして等号は $t = T$ で成り立つ.

式(5.4.29)，(5.4.30)，(5.4.33)または(5.4.36)は不確定性を最小にする特別な初期条件でのみ成り立つのではなく，より一般的に正しい．このことが問題5-8の主題である.

5.5　量子作用原理

古典力学においては，ハミルトンの運動方程式は作用原理から導かれた．量子力学においても作用原理は存在するのだろうか？ もちろん存在する．今からそれを導こう.

時間を無限小だけずらせた，q 表示の状態間の変換関数

$$\langle q', t + \mathrm{d}t | q'', t\rangle = \langle q', t|\Big(1 - \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathrm{d}t\, H\big(q(t), p(t), t\big)\Big)|q'', t\rangle \tag{5.5.1}$$

について考え，これが何に等しいかではなく，この関数が依存するすべての量を変化させたときにどのように変化するかに注目しよう．まず以下の関係式

$$\frac{\partial}{\partial q'_\alpha}\langle q',t| = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle q',t|p_\alpha(t)\,,$$
$$\frac{\partial}{\partial t}\langle q',t| = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle q',t|H\big(q(t),p(t),t\big) \equiv -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle q',t|H(t) \tag{5.5.2}$$

を念頭において，ベクトルの変化

$$\delta_{q',t+\mathrm{d}t}\langle q',t+\mathrm{d}t| = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle q',t+\mathrm{d}t|\Big(\sum_\alpha p_\alpha(t+\mathrm{d}t)\delta q_\alpha(t+\mathrm{d}t) - H(t+\mathrm{d}t)\delta(t+\mathrm{d}t)\Big) \tag{5.5.3}$$

および

$$\delta_{q'',t}|q'',t\rangle = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\Big(\sum_\alpha p_\alpha(t)\delta q_\alpha(t) - H(t)\delta t\Big)|q'',t\rangle \tag{5.5.4}$$

をまとめると，関数の変化は次のようになる．

$$\delta'\langle q',t+\mathrm{d}t|q'',t\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle q',t+\mathrm{d}t|\Big(\sum_\alpha\big[p_\alpha(t+\mathrm{d}t)\delta q_\alpha(t+\mathrm{d}t) - p_\alpha(t)\delta q_\alpha(t)\big] - \big[H(t+\mathrm{d}t)\delta(t+\mathrm{d}t) - H(t)\delta t\big]\Big)|q'',t\rangle\,. \tag{5.5.5}$$

ここで $\delta' = \delta_{q',t+\mathrm{d}t} + \delta_{q'',t}$ である．次の関係

$$p_\alpha(t+\mathrm{d}t) = p_\alpha(t) + \mathrm{d}t\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}p_\alpha(t) = p_\alpha(t) - \mathrm{d}t\frac{\partial H}{\partial q_\alpha}\,,$$
$$H(t+\mathrm{d}t) = H(t) + \mathrm{d}t\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} = H(t) + \mathrm{d}t\frac{\partial H}{\partial t} \tag{5.5.6}$$

を使って，2 次以上の項はすべて無視して括弧の部分 $\big(\cdots\big)$ を書き直すと

$$\begin{aligned}\big(\cdots\big) &= \sum_\alpha p_\alpha(t)\big[\delta q_\alpha(t+\mathrm{d}t) - \delta q_\alpha(t)\big] - \mathrm{d}t\sum_\alpha \underbrace{\delta q_\alpha(t+\mathrm{d}t)}_{\to\,\delta q_\alpha(t)}\frac{\partial H}{\partial q_\alpha} \\ &\quad - H\delta\mathrm{d}t - \mathrm{d}t\frac{\partial H}{\partial t}\delta t \\ &= \delta'\Big(\sum_\alpha p_\alpha(t)\big[q_\alpha(t+\mathrm{d}t) - q_\alpha(t)\big] - \mathrm{d}t\,H(t)\Big) \\ &\quad - \sum_\alpha \delta p_\alpha(t)\underbrace{\big[q_\alpha(t+\mathrm{d}t) - q_\alpha(t)\big]}_{=\,\mathrm{d}q_\alpha\,=\,\mathrm{d}t\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}} + \mathrm{d}t\sum_\alpha\frac{\partial H}{\partial p_\alpha}\delta p_\alpha \\ &= \delta'\Big(\sum_\alpha p_\alpha(t)\big[q_\alpha(t+\mathrm{d}t) - q_\alpha(t)\big] - \mathrm{d}t\,H(t)\Big)\end{aligned} \tag{5.5.7}$$

となる．ここで δ' は式(5.5.5)と同様で，力学以外，つまりハミルトニアンの形以外

は，すべて変化させるということを意味する．H の形を変化させる部分を δ'' と書くと，以下のようになる．

$$\begin{aligned}\delta''\langle q',t+\mathrm{d}t|q'',t\rangle &= \delta''\langle q',t|\left(1-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\mathrm{d}t\,H\right)|q'',t\rangle \\ &= -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle q',t|\mathrm{d}t\,\delta''H|q'',t\rangle \\ &= -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle q',t+\mathrm{d}t|\mathrm{d}t\,\delta''H|q'',t\rangle\,. \end{aligned} \tag{5.5.8}$$

これは $\delta'(\cdots)$ の部分の構造と一致している．そこで $\delta=\delta'+\delta''$ とすることで，関数の変化は

$$\delta\langle q',t+\mathrm{d}t|q'',t\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle q',t+\mathrm{d}t|\delta W_{t+\mathrm{d}t,t}|q'',t\rangle \tag{5.5.9}$$

の形に書ける．ここで

$$W_{t+\mathrm{d}t,t} = \mathrm{d}t\,L(t) \quad \text{ただし} \quad L=\sum_\alpha p_\alpha\frac{\mathrm{d}q_\alpha}{\mathrm{d}t}-H \tag{5.5.10}$$

である．p_α と $\mathrm{d}q_\alpha/\mathrm{d}t$ の積の順序は，変分をとった後では問題にならないことに注意しよう．なぜなら δp_α と δq_α は数(厳密には数に単位記号 1 を掛けたもの)であり，すべての演算子と交換するからである．

さてここで，連続した 2 つの無限小の時間間隔 $t\to t+\mathrm{d}t\to t+2\mathrm{d}t$ の場合について考えよう．

$$\langle q',t+2\mathrm{d}t|q'',t\rangle = \int\langle q',t+2\mathrm{d}t|\bar{q},t+\mathrm{d}t\rangle(\mathrm{d}\bar{q})\langle\bar{q},t+\mathrm{d}t|q'',t\rangle\,. \tag{5.5.11}$$

上の式の変化 $\delta\langle q',t+2\mathrm{d}t|q'',t\rangle$ を各時間間隔での前述の結果を使って計算してみると

$$\begin{aligned}&\delta\langle q',t+2\mathrm{d}t|q'',t\rangle \\ &\quad= \int\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle q',t+2\mathrm{d}t|\delta W_{t+2\mathrm{d}t,t+\mathrm{d}t}|\bar{q},t+\mathrm{d}t\rangle(\mathrm{d}\bar{q})\langle\bar{q},t+\mathrm{d}t|q'',t\rangle \\ &\quad\quad+\int\langle q',t+2\mathrm{d}t|\bar{q},t+\mathrm{d}t\rangle(\mathrm{d}\bar{q})\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle\bar{q},t+\mathrm{d}t|\delta W_{t+\mathrm{d}t,t}|q'',t\rangle \\ &\quad= \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle q',t+2\mathrm{d}t|\left(\delta W_{t+2\mathrm{d}t,t+\mathrm{d}t}+\delta W_{t+\mathrm{d}t,t}\right)|q'',t\rangle \end{aligned} \tag{5.5.12}$$

となるので，結果は以下のようになる．

$$\delta W_{t+2\mathrm{d}t,t} = \delta W_{t+2\mathrm{d}t,t+\mathrm{d}t}+\delta W_{t+\mathrm{d}t,t}\,. \tag{5.5.13}$$

これより，変化は，各々の変化の和から作られる W を使うと同じ構造をしていることがわかる．このことを一般化することで，直ちに有限の時間間隔に対して次の結果を得る．これが**量子作用原理**である．

$$\delta\langle q', t_1 | q'', t_2\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle q', t_1 | \delta W_{12} | q'', t_2\rangle$$

$$\text{ここで} \quad W_{12} = \int_{t_1}^{t_2} \mathrm{d}t\, L(t)\ . \tag{5.5.14}$$

W は $\hbar$ −作用−の次元を持つ作用演算子であり，L は式(5.5.10)で初めて出てきた，ラグランジアンまたはラグランジュ*の演算子である．

5.6 停留作用の原理

時間変換関数 $\langle q', t_1 | q'', t_2\rangle$ は，ベクトル $\langle q', t_1|$ および $|q'', t_2\rangle$ で指定される終状態および初期状態に依存し，また時間発展を支配するハミルトニアンの形に依存する．いまハミルトニアンが与えられたとすると，変化させることのできるのは初期および終状態のみであり，それを以下のように書こう．

$$\delta\langle q', t_1| = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle q', t_1|G_1\ , \qquad \delta|q'', t_2\rangle = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}G_2|q'', t_2\rangle\ . \tag{5.6.1}$$

ここで生成演算子 G_1 および G_2 は各々の時間における物理変数から作られる無限小のエルミート演算子である．これより

$$\delta\langle q', t_1 | q'', t_2\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle q', t_1|\big(G_1 - G_2\big)|q'', t_2\rangle \tag{5.6.2}$$

となり，次の結論

$$\delta W_{12} = G_1 - G_2 \tag{5.6.3}$$

を得る．

これが**停留作用の原理**である．このことから，式(5.5.14)からすれば時間 t_1 および t_2 の間のすべての時間 t に依存すると考えられる無限小変化 W_{12} は，実は両端の時間 t_1 と t_2 における変分のみに依り，その間の時間での変分に対しては変化しないことがわかる．そこで今度は逆に，この唯一の基本的な動力学的原理から運動方程式と交換関係が導かれることを示そう．

両端での時間変化 δt_1 と δt_2 に関して，t をある変数 τ の関数 $t = t(\tau)$ とし，τ は変化させないで以下のように関数形を変化させる方が扱いやすい．

$$\delta t = \delta t(\tau)\ , \qquad \delta t_1 = \delta t(\tau_1)\ , \quad \delta t_2 = \delta t(\tau_2)\ . \tag{5.6.4}$$

そして積分変数は暗に τ だと理解することにすると，作用演算子は次のようになる．

$$W_{12} = \int_2^1 \Big(\sum_\alpha p_\alpha \mathrm{d}q_\alpha - H\mathrm{d}t\Big)\ . \tag{5.6.5}$$

---

*Joseph Louis de LAGRANGE (1736–1813)

ここでたとえば

$$\delta \mathrm{d}q_\alpha(t) = \delta[q_\alpha(t+\mathrm{d}t) - q_\alpha(t)]$$
$$= \delta q_\alpha(t+\mathrm{d}t) - \delta q_\alpha(t) = \mathrm{d}\delta q_\alpha(t) \tag{5.6.6}$$

に注意すると，記号的には以下のように書け

$$\delta \mathrm{d} = \mathrm{d}\delta \tag{5.6.7}$$

変分は次のようになる．

$$\delta W_{12} = \int_2^1 \Big(\sum_\alpha (\delta p_\alpha \mathrm{d}q_\alpha + p_\alpha \mathrm{d}\delta q_\alpha) - \delta H \mathrm{d}t - H\mathrm{d}\delta t\Big)$$
$$= \int_2^1 \Big(\sum_\alpha (\delta p_\alpha \mathrm{d}q_\alpha - \mathrm{d}p_\alpha \delta q_\alpha) - \delta H \mathrm{d}t + \mathrm{d}H\delta t\Big)$$
$$+ \int_2^1 \mathrm{d}\Big(\sum_\alpha p_\alpha \delta q_\alpha - H\delta t\Big) . \tag{5.6.8}$$

最後の項は両端での値のみに関係している．

$$\int_2^1 \mathrm{d}\Big(\sum_\alpha p_\alpha \delta q_\alpha - H\delta t\Big) = \Big(\sum_\alpha p_\alpha \delta q_\alpha - H\delta t\Big)\Big|_2^1 . \tag{5.6.9}$$

したがって，停留作用原理より，式(5.6.8)の右辺の最初の項の被積分関数はその間の時間においてゼロでなければならない．

$$\delta H = \frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}\delta t + \sum_\alpha \left(\delta p_\alpha \frac{\mathrm{d}q_\alpha}{\mathrm{d}t} - \frac{\mathrm{d}p_\alpha}{\mathrm{d}t}\delta q_\alpha\right) . \tag{5.6.10}$$

ここで q および p について次のような特別の性質を導入しよう．つまり δq_α および δp_α は単位演算子に数値を掛けたものであり，さらにそれらはすべての q および p と交換するとしよう．すると関係式

$$\frac{\mathrm{d}q_\alpha}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial p_\alpha} , \qquad -\frac{\mathrm{d}p_\alpha}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial q_\alpha} , \qquad \frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial t} \tag{5.6.11}$$

が推測でき，以下の結果が得られる．

$$\delta W_{12} = G_1 - G_2 . \tag{5.6.12}$$

ここで G_i は次の式の各端点での値である．

$$G = \sum_\alpha p_\alpha \delta q_\alpha - H\delta t . \tag{5.6.13}$$

次の式

$$G_t = -H\delta t \tag{5.6.14}$$

を時間の無限小変化に対する生成演算子と解釈することで，ハイゼンベルクの演算子の運動方程式，およびシュレーディンガーのベクトルの運動方程式を導くことができる．

また，次の式

$$G_q = \sum_\alpha p_\alpha \delta q_\alpha \tag{5.6.15}$$

を，q の無限小変位の生成演算子と解釈することで

$$\delta_q F = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[F, G_q] \qquad \text{または} \qquad \frac{\partial F}{\partial q_\beta} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[F, p_\beta] \tag{5.6.16}$$

となり，次の基本的な交換関係が得られる．

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[q_\alpha, p_\beta] = \frac{\partial q_\alpha}{\partial q_\beta} = \delta_{\alpha\beta}\ , \qquad \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[p_\alpha, p_\beta] = \frac{\partial p_\alpha}{\partial q_\beta} = 0\ . \tag{5.6.17}$$

この方法では交換関係 $[q_\alpha, q_\beta] = 0$ を得ることはできない．しかしこの交換関係は両立する q の状態を選んだ段階で暗に仮定されていたことである．そしてこれらの状態に対する G_q の効果は

$$\delta_q \langle q', t| = \langle q', t| \frac{\mathrm{i}}{\hbar} G_q \tag{5.6.18}$$

つまり

$$\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial}{\partial q'_\alpha} \langle q', t| = \langle q', t| p_\alpha(t) \tag{5.6.19}$$

となる．

さて，これに対して，両立できるつまり互いに交換する物理量の完全な組として，p 全体を最初に選ぶことも可能である．この場合は作用原理は以下のようになる．

$$\delta\langle p', t_1|p'', t_2\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle p', t_1|\delta\left(\int_2^1 \mathrm{d}t\, L_p\right)|p'', t_2\rangle\ . \tag{5.6.20}$$

ここでラグランジアンを以下のように書いた．

$$L_p = -\sum_\alpha \frac{\mathrm{d}p_\alpha}{\mathrm{d}t} q_\alpha - H\ . \tag{5.6.21}$$

添え字は今までのラグランジアンと区別するためで，L_p は以下の L_q において $q \to p$ および $p \to -q$ と置き換えることで得られる．

$$L_q = \sum_\alpha p_\alpha \frac{\mathrm{d}q_\alpha}{\mathrm{d}t} - H\ . \tag{5.6.22}$$

演算子に対する運動方程式は上記の置き換えで形を変えないで

$$\frac{\mathrm{d}q_\alpha}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial p_\alpha} \longleftrightarrow \frac{\mathrm{d}p_\alpha}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial H}{\partial q_\alpha} \tag{5.6.23}$$

となる．もちろんこれらは新しい作用を使っても得られる．今までと異なるのは G の形である．

$$G = G_p + G_t \,, \qquad G_p = -\sum_\alpha q_\alpha \delta p_\alpha \,. \tag{5.6.24}$$

演算子 G_p の意味より

$$\delta_p F = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[F, G_p] \qquad \text{または} \qquad \frac{\partial F}{\partial p_\alpha} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[q_\alpha, F] \tag{5.6.25}$$

となり，次の交換関係が得られる．

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[q_\alpha, p_\beta] = \frac{\partial p_\beta}{\partial p_\alpha} = \delta_{\alpha\beta} \qquad \text{および} \qquad \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[q_\alpha, q_\beta] = \frac{\partial q_\beta}{\partial p_\alpha} = 0 \,. \tag{5.6.26}$$

このようにして，L_q および L_p の両方のラグランジアンを用いると基本的なすべての交換関係を導出できる．

5.7　記述法の変更

$q \to p$ および $p \to -q$ と置き換えることで得られた L_p が L_q と同じ運動方程式を与えることはわかったが，ここで注目すべき点は

$$L_q - L_p = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sum_\alpha p_\alpha q_\alpha \tag{5.7.1}$$

という，より基本的な関係式である．つまり，一般的に

$$L - \overline{L} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} w \tag{5.7.2}$$

の関係があれば，ラグランジアン $\overline{L}$ は L と同じ運動方程式を与える．

$$W_{12} - \overline{W}_{12} = w_1 - w_2 \tag{5.7.3}$$

そして $\overline{W}_{12}$ に対して停留作用原理を適用した場合も，W_{12} に対して適用して得られたものと同じ結果を与える．なぜなら両者の差は両端でのみ現れ，その間の時間においては差がないからである．残る両端での項は

$$(G_1 - G_2) - (\overline{G}_1 - \overline{G}_2) = \delta w_1 - \delta w_2 \,. \tag{5.7.4}$$

となる．つまり，次の式の両端での時間 t_1 および t_2 での差の演算子である．

$$G - \overline{G} = \delta w \,. \tag{5.7.5}$$

この演算子は L_q と L_p の場合には次のようになる．

$$G_q - G_p = \sum_\alpha p_\alpha \delta q_\alpha + \sum_\alpha q_\alpha \delta p_\alpha = \delta \sum_\alpha q_\alpha p_\alpha \,. \tag{5.7.6}$$

これより q および p 表示で記述した関数を結ぶ変換関数は，

$$\delta\langle q'|p'\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle q'|(G_q - G_p)|p'\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\Big(\delta\sum_\alpha q'_\alpha p'_\alpha\Big)\langle q'|p'\rangle \tag{5.7.7}$$

より直接求められて，以下のようになる．

$$\langle q'|p'\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{n/2}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_\alpha q'_\alpha p'_\alpha}\,. \tag{5.7.8}$$

ここで前の定数は式(5.3.20)同様，次の規格化の条件から決まる．

$$\int\langle q'|p'\rangle\,(\mathrm{d}p')\,\langle p'|q''\rangle = \delta(q' - q'')\,. \tag{5.7.9}$$

5.8 許される変化

p と q についてはその性質をすべて知っているとして話を進めてきた．さてここで，話を逆にして量子作用原理から出発してみよう．

$$\delta\langle 1|2\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle 1|\delta W_{12}|2\rangle \qquad \text{ただし} \qquad W_{12} = \int_2^1 \mathrm{d}t\,L\,. \tag{5.8.1}$$

ここで

$$L = \sum_\alpha p_\alpha \cdot \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}q_\alpha - H(q,p,t) \qquad \Big[-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}w\Big] \tag{5.8.2}$$

であり，演算子 p および q については，前もって知識は無いとする．簡単のため，2個の演算子の対称化された積に対して

$$A\,.\,B \equiv \frac{1}{2}\{A,B\} = \frac{1}{2}(AB + BA) \tag{5.8.3}$$

の記法を使うと，対称化により積 $p_\alpha\,.\,\mathrm{d}q_\alpha$ がエルミートであることが保証される．演算子 p と q の性質を推察するのに他にどのような情報がいるのだろうか？ そしてどの程度一般的な変化が可能なのだろうか？

ハミルトニアン H が与えられたとすると，停留作用の原理は次のようになる．

$$\begin{aligned}\delta W_{12} &= G_1 - G_2\\ &= \int_2^1\Big(\sum_\alpha\big[\delta p_\alpha\,.\,\mathrm{d}q_\alpha - \mathrm{d}p_\alpha\,.\,\delta q_\alpha\big] - \delta H\mathrm{d}t + \mathrm{d}H\delta t\Big)\\ &\quad + \int_2^1 \mathrm{d}\Big(\sum_\alpha p_\alpha\,.\,\delta q_\alpha - H\delta t\Big)\,.\end{aligned} \tag{5.8.4}$$

これは式(5.6.3)および(5.6.8)において，対称積としたものであり，以下の結果を得る．

$$\delta H = \sum_\alpha\Big(\delta p_\alpha\,.\,\frac{\mathrm{d}q_\alpha}{\mathrm{d}t} - \frac{\mathrm{d}p_\alpha}{\mathrm{d}t}\,.\,\delta q_\alpha\Big) + \frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}\delta t\,. \tag{5.8.5}$$

この時点では δq_α および δp_α はまだ規定されていない演算子である．いろいろな可能性の中で，δq_α と δp_α が q および p と交換する演算子であると仮定しよう．すると結果はすべて以前と同じで

$$\delta H = \sum_\alpha \left(\delta p_\alpha \frac{\mathrm{d}q_\alpha}{\mathrm{d}t} - \frac{\mathrm{d}p_\alpha}{\mathrm{d}t}\delta q_\alpha\right) + \frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}\delta t\,,$$
$$\frac{\partial H}{\partial p_\alpha} = \frac{\mathrm{d}q_\alpha}{\mathrm{d}t}\,, \qquad \frac{\partial H}{\partial q_\alpha} = -\frac{\mathrm{d}p_\alpha}{\mathrm{d}t}\,, \qquad \frac{\partial H}{\partial t} = \frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t} \tag{5.8.6}$$

および

$$G_q = \sum_\alpha p_\alpha \delta q_\alpha \tag{5.8.7}$$

となる．さらに式(5.8.2)で $w = \sum_\alpha q_\alpha \cdot p_\alpha$ と仮定すると

$$G_p = -\sum_\alpha \delta p_\alpha q_\alpha \tag{5.8.8}$$

となる．

さて，δH の一般的な表現に戻って書くと，次のようになる．

$$\delta H \doteq \sum_\alpha \left(\delta p_\alpha \cdot \frac{\partial H}{\partial p_\alpha} + \delta q_\alpha \cdot \frac{\partial H}{\partial q_\alpha}\right) + \frac{\partial H}{\partial t}\delta t\,. \tag{5.8.9}$$

ここで，もしこれらの変分が以下のように無限小のユニタリー変換で表せるとすると，q と p の交換関係は保たれ

$$\delta q_\alpha = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[q_\alpha, G] = \frac{\partial G}{\partial p_\alpha}\,,$$
$$\delta p_\alpha = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[p_\alpha, G] = -\frac{\partial G}{\partial q_\alpha}\,,$$
$$\delta H = \frac{\partial H}{\partial t}\delta t + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[H, G] \tag{5.8.10}$$

つまり

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[H, G] = \sum_\alpha \left(\frac{\partial H}{\partial q_\alpha} \cdot \frac{\partial G}{\partial p_\alpha} - \frac{\partial H}{\partial p_\alpha} \cdot \frac{\partial G}{\partial q_\alpha}\right) = (H, G) \tag{5.8.11}$$

となる．

しかし問題 5-10a からわかるように，この交換関係と対称化されたポアソン*ブラケットの恒等式は，任意の H に対して，G が q および p の 3 次式より次数が低いときのみ成立する．もう 1 つの認識すべき点は，たとえば次の式である．

$$G = \sum_\alpha p_\alpha \cdot \delta q_\alpha = \sum_\alpha p_\alpha \cdot \frac{\partial G}{\partial p_\alpha}\,. \tag{5.8.12}$$

*Siméon Denise Poisson (1781–1840)

これは，δq_α を生成する G の p に依存する部分は p に関して線型でなければならないことを意味する．同様に G は q に関しても線型でなければならない．この点については一般的に以下のことを思い出そう．いくつかの変数 $x_1, \ldots, x_n$ の関数 f が線型であるとは以下の関係を意味する．

$$f(\lambda x_1, \ldots, \lambda x_n) = \lambda f(x_1, \ldots, x_2)\,. \tag{5.8.13}$$

ここで $\lambda = 1 + \delta\lambda$ とすると

$$\begin{aligned} f(x_1 + \delta\lambda\, x_1, \ldots, x_n + \delta\lambda\, x_n) &= f(x) + \delta\lambda \sum_k x_k \frac{\partial f}{\partial x_k} \\ &= f(x) + \delta\lambda\, f(x) \end{aligned} \tag{5.8.14}$$

となり，これより

$$\sum_k x_k \frac{\partial f}{\partial x_k} = f \tag{5.8.15}$$

を得る．これが線型な関数を特徴付けるものである．もちろん次の場合は p と q に関して線型であり，したがって G に課せられた線形性を満たしている．

$$G_q = \sum_\alpha p_\alpha \delta q_\alpha \qquad \text{ここで } \delta q_\alpha \text{ は数値} \tag{5.8.16}$$

しかしながら次のような可能性もある．G は p について線型でかつ q についても線型であるとすると，以下のように q と p の 2 次式となる．

$$G = \sum_{\alpha,\beta} p_\alpha \cdot g_{\alpha\beta} q_\beta\,,$$

$$\delta q_\alpha = \frac{\partial G}{\partial p_\alpha} = \sum_\beta g_{\alpha\beta} q_\beta\,, \qquad \delta p_\beta = -\frac{\partial G}{\partial q_\beta} = -\sum_\alpha p_\alpha g_{\alpha\beta}\,. \tag{5.8.17}$$

ここで $g_{\alpha\beta}$ は数値である．このような型の可能性については 8.3 章において議論する．

問題

5-1　力学変数 v_α は力学的に時間に依存するがあらわには依らない．これとは対照的に確率演算子(問題 1-30 を参照)は時間にまったく依存せず $P(v(t_1), t_1) = P(v(t_2), t_2)$ である．次の式を示せ．

$$\frac{\partial}{\partial t} P = \frac{\mathrm{i}}{\hbar} [P, H]\,.$$

これはしばしばフォン・ノイマン*方程式と呼ばれる．力学変数はこの方程式においてどの共通時間に関係していてもよいことを示せ．

*John (János) von Neumann (1903–1957)

5-2a　異なる時刻 t と t' での記述はユニタリーな時間発展演算子 U でもって互いに関係付けられる.

$$\langle \ldots, t| = \langle \ldots, t'| U_{t,t'}\big(v(t)\big) .$$

ここで演算子はあらわな時間依存性と，力学変数 $v(t)$ を通した力学的な時間依存性の両方を持つ．U は次の運動方程式にしたがうことを示せ.

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} U_{t,t'} = HU , \qquad \mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} U_{t,t'} = UH .$$

ただし $H = H\big(v(t), t\big)$ はハミルトニアンである．時間発展演算子の時間による偏微分と全微分の本質的な差に注意すること.

5-2b　初めに，$v(t) \to v(t')$ の置き換えは全体として $U_{t,t'}$ を変えないことを示せ.

$$U_{t,t'}\big(v(t)\big) = U_{t,t'}\big(v(t')\big) .$$

そして次の群論的な性質を証明せよ.

$$U_{t,t''}\big(v(t)\big) = U_{t',t''}\big(v(t')\big) U_{t,t'}\big(v(t)\big) = U_{t,t'}\big(v(t)\big) U_{t',t''}\big(v(t)\big) .$$

つまり，簡潔に書くと $U_{t,t''} = U_{t,t'} U_{t',t''}$ である.

5-3　観測量 A の広がり δA とハミルトニアン H の広がり δH は次の不等式を満たすことを示せ.

$$\delta A\, \delta H \geq \frac{\hbar}{2} \left| \left\langle \frac{\mathrm{d}A}{\mathrm{d}t} - \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle \right| .$$

5-4　スリットが時間 δt の間開いていて，x 軸方向に出てくる粒子の平均の速度は以下で与えられる.

$$v = \frac{\partial E}{\partial p} .$$

ビームの長さ δx はいくらか？ ビームの持つ避けることのできない運動量の広がり δp はいくらか？ これに関するエネルギーについての広がり δE は次の式のようになることを示せ.

$$\delta E\, \delta t \gtrsim \hbar .$$

5-5　シュテルン・ゲルラッハの実験：スピン $\frac{1}{2}\hbar$，磁気モーメントの z 成分を $\pm\mu$，不均一磁場を $(\mathrm{d}/\mathrm{d}z)B_z(z)$，そして磁場中にいる時間を t とする．実験を機能させるためには，時間 t の間に得る正または負の z 方向の運動量はビーム内の z 方向の運動量の広がり δp_z（の半分）より大きくなくてはいけない．この条件を式で表せ．また，ハイゼンベルクの不確定性原理より，z の広がり δz はある値より大きいことが要請され

る．このことは時間 t の間の角運動量 $\boldsymbol{s}$ の xy 平面での回転角 ϕ を広がりを意味する．$\boldsymbol{\mu} = \gamma \boldsymbol{s}$ に基づいて，ϕ に対するトルクの方程式を書け（この方法で導けないならハミルトニアン $H = -\gamma s_z B_z(z)$ から量子力学的に導け）．これより $\delta\phi$ を求めよ．シュテルン・ゲルラッハの測定のどのような知られた非古典的な性質が $\delta\phi$ についての不等式から出てくるか？

5-6 原子の 2 重縮退状態に対するシュテルン・ゲルラッハの実験で，原子が磁場 $B_z(z)$ の中にいる時間 δt の間の 2 つの状態のエネルギー差を E とする．ビームの幅 δz による広がり δE はどうなるか．実験を機能させるための条件より，次の関係式を示せ．

$$\delta E \, \delta t \gtrsim \hbar \, .$$

5-7a 自由度が 1 でハミルトニアンを $H = p^2/(2M)$ とする．時間 $t = 0$ で不確定性が最小の状態 $|\delta\rangle$ にあるとして，運動方程式を解いて以下の量を計算せよ．

$$\left[\delta x(t)\right]^2 = \left\langle \left[x(t) - \langle x(t)\rangle_\delta\right]^2 \right\rangle_\delta \quad \text{および} \quad \left[\delta p(t)\right]^2 .$$

5-7b 式(5.4.34)より，不等式 $[\delta x(t)]^2 \ \geq \ \hbar t/M$ が成り立つ．1 個の電子に対して $t = 10^{-16}\,\mathrm{s}$ および $1\,\mathrm{s}$ における $\delta x(t)$ を求めよ．質量が $1\,\mathrm{g}$ の物質について，$\delta x(t) > 1\,\text{Å}$ となるのは t がどのくらいになったときか．

5-8a 5.4 節の，質量が M で x 軸上を自由に運動している粒子についてもう一度考えてみよう．ただしここでは，時間 $t = 0$ で不確定性が最小の状態ではなく，任意の初期状態について考えてみる．まずハイゼンベルクの運動方程式を解いて，期待値 $\langle x(t)\rangle$, $\langle p(t)\rangle$, $\langle [x(t)]^2\rangle$, $\langle [p(t)]^2\rangle$, および $\frac{1}{2}\left\langle [x(t)p(t) + p(t)x(t)]\right\rangle$ をそれらの初期値を使って求めよ．それらを使って次の式を示せ．

$$\delta x(t) = \delta x \sqrt{1 - 2tt_0/T^2 + (t/T)^2}$$

ただし T は式(5.4.35)で与えられており，また t_0 は次の量である．

$$t_0 = -\frac{M}{(\delta p)^2}\left[\tfrac{1}{2}\langle xp + px\rangle - \langle x\rangle\langle p\rangle\right] .$$

t_0 の物理的な意味は何か？

5-8b 問題 2-17a の制限はどのようになっているか（そこでの $\delta q\, \delta p$ はもちろんここでの $\delta x\, \delta p/\hbar$ のことである）？

5-9a 問題 2-8a を思い出し，次の式を示せ．

$$U(q',p')U(q'',p'') = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\mathrm{i}(q'p''-q''p')}U(q'+q'',p'+p'') ,$$
$$U(q'',p'')U(q',p') = \mathrm{e}^{\frac{1}{2}\mathrm{i}(q'p''-q''p')}U(q'+q'',p'+p'') .$$

5-9b どんな $F(q,p)$ も

$$F(q,p) = \int \frac{\mathrm{d}q'\,\mathrm{d}p'}{2\pi} f(q',p')U(q',p')$$

のように書くことができ，同様に

$$G(q,p) = \int \frac{\mathrm{d}q''\,\mathrm{d}p''}{2\pi} g(q'',p'')U(q'',p'') .$$

と書くことができる．これを示すために，$f(q',p')$ を問題 2-7a の正規化された行列で表せ．

5-9c 次の式を示せ．

$$\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}D}FG = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}D}GF .$$

ただし D は($\hbar$ を導入して)以下で与えられる．

$$D = \hbar\left(\frac{\partial}{\partial q_F}\frac{\partial}{\partial p_G} - \frac{\partial}{\partial p_F}\frac{\partial}{\partial q_G}\right) .$$

ここでたとえば $\partial/\partial q_F$ は F の中の q に関する微分を意味する．

5-10a F と G の対称化された積を次のように((5.8.3)節を参照)書くことにし，

$$F\,.\,G \equiv \tfrac{1}{2}(FG+GF) = \tfrac{1}{2}\{F,G\}$$

これを使って問題 5-9c を次のように書き直す．

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[F,G] = \frac{\tan(\frac{1}{2}D)}{\frac{1}{2}D}(F,G) .$$

ここで

$$(F,G) = \frac{D}{\hbar}F\,.\,G = \frac{\partial F}{\partial q}\cdot\frac{\partial G}{\partial p} - \frac{\partial F}{\partial p}\cdot\frac{\partial G}{\partial q}$$

は対称化されたポアソンブラケットである．もし F または G の次数が q または p の 3 次式より低いか，または F と G がともに q の 3 次式または p の 3 次式より低いならば，以下のようになることを示せ．

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[F,G] = (F,G) .$$

5-10b $[F_1F_2,G] = F_1[F_2,G]+[F_1,G]F_2$ 等を使って，$(\mathrm{i}\hbar)^{-1}[q^2,p^2]$ および $(\mathrm{i}\hbar)^{-1}[q^3,p$

を直接計算せよ．そして結果を問題 5-10a の推察と比べよ．

5-11 5.5 節において作用演算子

$$W_{12}^{(qq)} = \int_1^2 \Big(\sum_\alpha p_\alpha \cdot \mathrm{d}q_\alpha - H\mathrm{d}t\Big)$$

を使って，次の式を導いた．

$$\delta\big\langle q', t_1\big|q'', t_2\big\rangle = \frac{i}{\hbar}\big\langle q', t_1\big|\delta W_{12}^{(qq)}\big|q'', t_2\big\rangle\,.$$

また 5.6 節では演算子

$$W_{12}^{(pp)} = \int_1^2 \Big(-\sum_\alpha q_\alpha \cdot \mathrm{d}p_\alpha - H\mathrm{d}t\Big)$$

を使うと次のようになることを示した．

$$\delta\big\langle p', t_1\big|p'', t_2\big\rangle = \frac{i}{\hbar}\big\langle p', t_1\big|\delta W_{12}^{(pp)}\big|p'', t_2\big\rangle\,.$$

ここでは

$$\delta\big\langle q', t_1\big|p'', t_2\big\rangle = \frac{i}{\hbar}\big\langle q', t_1\big|\delta W_{12}^{(qp)}\big|p'', t_2\big\rangle$$

および

$$\delta\big\langle p', t_1\big|q'', t_2\big\rangle = \frac{i}{\hbar}\big\langle p', t_1\big|\delta W_{12}^{(pq)}\big|q'', t_2\big\rangle$$

の 2 式について考えよう．これらに対応する作用演算子はそれぞれ次の式

$$\begin{aligned} W_{12}^{(qp)} &= W_{12}^{(qq)} + \sum_\alpha p_\alpha(t_2)\cdot q_\alpha(t_2) \\ &= W_{12}^{(pp)} + \sum_\alpha p_\alpha(t_1)\cdot q_\alpha(t_1) \end{aligned}$$

および次の式のようになることを示せ．

$$\begin{aligned} W_{12}^{(pq)} &= W_{12}^{(qq)} - \sum_\alpha p_\alpha(t_1)\cdot q_\alpha(t_1) \\ &= W_{12}^{(pp)} - \sum_\alpha p_\alpha(t_2)\cdot q_\alpha(t_2)\,. \end{aligned}$$

5-12 無限小回転の生成演算子 $\delta\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{J}$ は，もし $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}+\boldsymbol{s}$ が考えている量子的対象の位置ベクトル $\boldsymbol{r}$，運動量ベクトル $\boldsymbol{p}$ およびスピンベクトル $\boldsymbol{s}$ で作られる場合は，(5.8) 節の双 1 次形式であることを示せ．

第6章

簡単な応用

問題を解くに当たって作用原理がどのように機能するかを調べてみよう．この章では1つの粒子(位置 x，運動量 p，質量 M)の1次元運動で，力が働かない場合，一定の力，そして線形の復元力の影響下にある場合を考えることにする．

6.1 時間変換関数

6.1.1 自由粒子

自由粒子のハミルトニアンは

$$H = \frac{p^2}{2M} \tag{6.1.1}$$

であるから，量子作用原理は

$$\delta\langle x', t|x''\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle x', t|\left[p(t)\delta x' - p\delta x'' - \delta t\frac{p^2}{2M}\right]|x''\rangle \tag{6.1.2}$$

と表される．簡単のためにこの章では，$|x''\rangle \equiv |x'', t = 0\rangle$，$p \equiv p(t = 0)$，および $x \equiv x(t = 0)$ と記す．ハイゼンベルクの運動方程式

$$\frac{\mathrm{d}x(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{p(t)}{M}, \qquad \frac{\mathrm{d}p(t)}{\mathrm{d}t} = 0 \tag{6.1.3}$$

を解くと，時間 t での演算子は直ちに

$$p(t) = p, \qquad x(t) = x + \frac{p}{M}t, \qquad [x, x(t)] = \frac{\mathrm{i}\hbar t}{M} \tag{6.1.4}$$

で与えられる．これらを用いて運動量演算子を消去すると

$$\delta\langle x', t|x''\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle x', t|\left[\frac{M}{t}(x(t) - x)(\delta x' - \delta x'') - \delta t\frac{M}{2t^2}(x(t) - x)^2\right]|x''\rangle \tag{6.1.5}$$

となる．ここで x と $x(t)$ が各々の固有ベクトルに隣接するように変形すると次のようになる．

$$\big(x(t)-x\big)^2=\big(x(t)\big)^2+x^2-x(t)x-\underbrace{xx(t)}_{=x(t)x+\mathrm{i}\hbar t/M}$$
$$=\big(x(t)\big)^2-2x(t)x+x^2-\frac{\mathrm{i}\hbar t}{M}\,. \tag{6.1.6}$$

すると式(6.1.5)の $\big[\cdots\big]$ 内の演算子は固有値を用いて表され，その結果まず

$$\frac{\delta\big\langle x',t\big|x''\big\rangle}{\big\langle x',t\big|x''\big\rangle}=\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left[\frac{M}{t}(x'-x'')(\delta x'-\delta x'')-\frac{\delta t}{t^2}\frac{M}{2}(x'-x'')^2+\mathrm{i}\hbar\frac{1}{2}\frac{\delta t}{t}\right]$$
$$=\delta\left[\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{M}{2t}(x'-x'')^2+\log\frac{1}{\sqrt{t}}+\log C\right] \tag{6.1.7}$$

とまとめることができる．この方程式を積分すると

$$\big\langle x',t\big|x''\big\rangle=\frac{C}{\sqrt{t}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{M}{2t}(x'-x'')^2} \tag{6.1.8}$$

となり，積分定数 C は初期条件

$$\big\langle x',t\big|x''\big\rangle\to\big\langle x'\big|x''\big\rangle=\delta(x'-x'')\qquad\qquad (t\to 0) \tag{6.1.9}$$

によって以下のように決まる．まず，積分

$$\int \mathrm{d}(x'-x'')\,\big\langle x',t\big|x''\big\rangle=C\sqrt{\frac{2\pi\mathrm{i}\hbar}{M}} \tag{6.1.10}$$

は，実際には t に依存しないから常に 1 に等しくなければならない．したがって

$$C=\sqrt{\frac{M}{2\pi\mathrm{i}\hbar}}\,,\qquad \big\langle x',t\big|x''\big\rangle=\sqrt{\frac{M}{2\pi\mathrm{i}\hbar t}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{M}{2t}(x'-x'')^2} \tag{6.1.11}$$

を得る．この時間変換関数はすでに式(5.4.16)で因子として現れている．

6.1.2　一定の力

この節ではハミルトニアン

$$H=\frac{p^2}{2M}-Fx\qquad\qquad (\,F\ \text{は定数}) \tag{6.1.12}$$

を考える．ハイゼンベルクの運動方程式は

$$\frac{\mathrm{d}x(t)}{\mathrm{d}t}=\frac{p(t)}{M}\,,\qquad \frac{\mathrm{d}p(t)}{\mathrm{d}t}=F \tag{6.1.13}$$

であり，確かに一定の力 F のもとでの運動方程式になっている．この方程式の解は

$$p(t)=p+Ft\,,\qquad x(t)=x+\frac{p}{M}t+\frac{1}{2}\frac{F}{M}t^2 \tag{6.1.14}$$

であり，この結果を用いると

$$\big[x,x(t)\big]=\frac{\mathrm{i}\hbar t}{M} \tag{6.1.15}$$

を得る．この交換子は F に依存していないことに注意しよう．

ここでの量子作用原理は

$$\delta\langle x',t|x''\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle x',t|\left[p(t)\delta x' - p\delta x'' - \delta t\left(\frac{p^2}{2M} - Fx\right)\right]|x''\rangle \tag{6.1.16}$$

と表される．これをさらに役立つ形にするために $[\cdots]$ を x と $x(t)$ で表し，$x(t)$ を左に，そして x を右に移して，おのおのの固有ベクトルに隣接するように変形する．そのためにまず式(6.1.14)を用いて運動量演算子を求めると，

$$p = \frac{M}{t}\left(x(t) - x - \frac{Ft^2}{2M}\right)\,,$$
$$p(t) = \frac{M}{t}\left(x(t) - x + \frac{Ft^2}{2M}\right) \tag{6.1.17}$$

となる．この 2 つの式は，時間を $t \leftrightarrow -t$ にすると同時に初期と終わりの量を

$$x(t) \leftrightarrow x\,, \quad p(t) \leftrightarrow p \tag{6.1.18}$$

と交換すると互いに移り変わることに注意しよう．この性質は 2 つの時間を t_1 と t_2 $(t = t_1 - t_2)$ とラベルを付けるとさらに明らかになる．すると，ちょうどすべての量の 2 つのラベル 1 と 2 の入れ換えについて議論していることに対応していることがわかる．

次に式(6.1.15)を用いると

$$\frac{p^2}{2M} = \frac{M}{2t^2}\left(\left[x(t)\right]^2 - 2x(t)x + x^2\right) - \frac{\mathrm{i}\hbar}{2t} - \frac{1}{2}F\left[x(t) - x\right] + \frac{F^2t^2}{8M} \tag{6.1.19}$$

となるから，式(6.1.16)の $[\cdots]$ は以下のように表される．

$$\begin{aligned}\left[\cdots\right] \to & \frac{M}{t}\left(x' - x'' + \frac{Ft^2}{2M}\right)\delta x' - \frac{M}{t}\left(x' - x'' - \frac{Ft^2}{2M}\right)\delta x'' \\ & - \delta t\left\{\frac{M}{2t^2}(x' - x'')^2 - \frac{\mathrm{i}\hbar}{2t} - \frac{1}{2}F(x' - x'') + \frac{F^2t^2}{8M} - Fx''\right\} \\ = & \,\delta\left\{\frac{M}{2t}(x' - x'')^2 - \mathrm{i}\hbar\log\frac{C}{\sqrt{t}} + \frac{1}{2}Ft(x' + x'') - \frac{F^2t^3}{24M}\right\} \\ = & \,\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\delta\langle x',t|x''\rangle}{\langle x',t|x''\rangle} = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\delta\log\langle x',t|x''\rangle\,.\end{aligned} \tag{6.1.20}$$

この方程式を積分すると，時間変換関数

$$\langle x',t|x''\rangle = \sqrt{\frac{M}{2\pi\mathrm{i}\hbar t}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{M}{2t}(x'-x'')^2}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Ft\frac{x'+x''}{2}}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{F^2t^3}{24M}} \tag{6.1.21}$$

を得る．積分定数 C は初期条件(6.1.9)により決まり，式(6.1.11)で与えられたものと一致することがわかる．この結果はすでに式(6.1.21)に取り入れてある．

6.1.3 線形復元力: 調和振動子

この節ではハミルトニアン

$$H = \frac{p^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega^2 x^2 \qquad (\omega \text{ は定数}) \tag{6.1.22}$$

を考える．ハイゼンベルクの運動方程式

$$\frac{\mathrm{d}x(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{p(t)}{M}, \qquad \frac{\mathrm{d}p(t)}{\mathrm{d}t} = -M\omega^2 x(t) \tag{6.1.23}$$

は調和振動子の運動方程式であり，距離 $x(t)$ に比例し平衡位置 $x = 0$ の方向に向いている線形復元力の影響下での運動を記述する．式(6.1.23)のよく知られた解は

$$\begin{aligned} x(t) &= x\cos(\omega t) + \frac{1}{M\omega}p\sin(\omega t)\,, \\ p(t) &= p\cos(\omega t) - M\omega x\sin(\omega t) \end{aligned} \tag{6.1.24}$$

であり，これを用いると交換子

$$\bigl[x, x(t)\bigr] = \frac{\mathrm{i}\hbar}{M\omega}\sin(\omega t) \tag{6.1.25}$$

を得る．

量子作用原理は

$$\delta\langle x', t|x''\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle x', t|\left[p(t)\delta x' - p\delta x'' - \delta t\left(\frac{p^2}{2M} + \frac{M\omega^2}{2}x^2\right)\right]|x''\rangle \tag{6.1.26}$$

である．この式の $[\cdots]$ 内の演算子を x と $x(t)$ で表そう．まず初めに運動量演算子を

$$\begin{aligned} p &= \frac{M\omega}{\sin(\omega t)}\bigl[x(t) - x\cos(\omega t)\bigr]\,, \\ p(t) &= \frac{M\omega}{\sin(\omega t)}\bigl[x(t)\cos(\omega t) - x\bigr] \end{aligned} \tag{6.1.27}$$

と表す．ここで再び時間を $t \leftrightarrow -t$ と置き換えると初期と終わりの量が入れ替わることに注意しよう．前節の例と同様にして，演算子の積を

$$\frac{p^2}{2M} = \frac{M\omega^2}{2\sin^2(\omega t)}\Bigl(\bigl[x(t)\bigr]^2 - 2x(t)x\cos\omega t + x^2\cos^2(\omega t)\Bigr) - \frac{\mathrm{i}\hbar\omega}{2}\frac{\cos(\omega t)}{\sin(\omega t)} \tag{6.1.28}$$

と表し，式(6.1.26)を以下のように書き換える．

$$\begin{aligned} \bigl[\cdots\bigr] \to{}& \frac{M\omega}{\sin(\omega t)}\bigl[x'\cos(\omega t) - x''\bigr]\delta x' + \frac{M\omega}{\sin(\omega t)}\bigl[x''\cos(\omega t) - x'\bigr]\delta x'' \\ &- \delta t\left\{\frac{M\omega^2}{2\sin^2(\omega t)}\bigl[x'^2 + x''^2 - 2x'x''\cos(\omega t)\bigr] - \frac{\mathrm{i}\hbar\omega}{2}\frac{\cos(\omega t)}{\sin(\omega t)}\right\} \\ ={}& \delta\left\{\frac{M\omega}{2\sin(\omega t)}\bigl[(x'^2 + x''^2)\cos(\omega t) - 2x'x''\bigr] - \mathrm{i}\hbar\log\sqrt{\frac{\omega}{\sin(\omega t)}}\right\} \\ ={}& \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\delta\log\langle x', t|x''\rangle\,. \end{aligned} \tag{6.1.29}$$

この方程式を積分すると次の式を得る.

$$\langle x',t|x''\rangle = C\sqrt{\frac{\omega}{\sin(\omega t)}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{M\omega}{2\sin(\omega t)}\left[(x'^2+x''^2)\cos(\omega t)-2x'x''\right]} \tag{6.1.30}$$

これは $\omega t \ll 1$ の極限で式(6.1.8)になり, したがって $t \to 0$ の極限で式(6.1.9)と一致するという要請により, 積分定数 C は式(6.1.11)で与えられた値を持つことがわかる. 以上より, 調和振動子の時間変換関数

$$\langle x',t|x''\rangle = \sqrt{\frac{M\omega}{2\pi\mathrm{i}\hbar}\frac{1}{\sin(\omega t)}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{M\omega}{2\sin(\omega t)}\left[(x'^2+x''^2)\cos(\omega t)-2x'x''\right]} \tag{6.1.31}$$

に到達した. ここで $\mathrm{i}\sin(\omega t)$ の平方根における任意性は見かけだけであることに注意しよう. 詳細については問題 6-12 を参照のこと.

6.2 短時間での振る舞い

時間 $t \to 0$ の極限では自由粒子の結果を再現することを前節で確認したが, これは力が作用する時間がないからである. そこで, t が小さく $\omega t \ll 1$ を満たすが, しかしゼロには近づかないと仮定しよう. まず恒等式

$$(x'^2+x''^2)\cos(\omega t)-2x'x'' = (x'-x'')^2\cos^2(\tfrac{1}{2}\omega t)-(x'+x'')^2\sin^2(\tfrac{1}{2}\omega t)\,,$$
$$\sin(\omega t) = 2\sin(\tfrac{1}{2}\omega t)\cos(\tfrac{1}{2}\omega t) \tag{6.2.1}$$

を用いて指数関数を書き直すと時間変換関数は

$$\langle x',t|x''\rangle = \sqrt{\frac{M\omega}{2\pi\mathrm{i}\hbar\sin(\omega t)}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{M\omega}{4}(x'-x'')^2\cot(\frac{1}{2}\omega t)} \times \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{M\omega}{4}(x'+x'')^2\tan(\frac{1}{2}\omega t)} \tag{6.2.2}$$

と後の計算で役に立つ形となる. ここで $\omega t \ll 1$ として

$$\cot(\tfrac{1}{2}\omega t) \cong (\tfrac{1}{2}\omega t)^{-1} + \left[\text{相対次数 }(\omega t)^2\text{ の項}\right],$$
$$\tan(\tfrac{1}{2}\omega t) \cong \tfrac{1}{2}\omega t + \tfrac{1}{3}(\tfrac{1}{2}\omega t)^3 + \left[\text{相対次数 }(\omega t)^4\text{ の項}\right] \tag{6.2.3}$$

と展開する. 正接 (tan) の展開で 1 つ高次の項まで展開する理由は, これと $(x'+x'')^2$ の積は大きくなり得るが, 一方 $(x'-x'')^2$ は必然的に小さく $\hbar t/M = [\hbar/(M\omega)]\omega t$ のオーダーであることによる. 実際, 原点を位置 $\overline{x}$ に移し

$$x' \to \overline{x}+x'\,,\quad x'' \to \overline{x}+x''\qquad \text{ただし}\quad |x'|,|x''| \ll |\overline{x}| \tag{6.2.4}$$

とすると, 変換関数は近似的に次のように表される.

$$\langle x',t|x''\rangle \cong \sqrt{\frac{M}{2\pi\mathrm{i}\hbar t}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{M}{2t}(x'-x'')^2}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}M\omega[\overline{x}^2+\overline{x}(x'+x'')](\frac{\omega t}{2}+\frac{\omega^3t^3}{24})}\,. \tag{6.2.5}$$

位置 $x=\overline{x}$ でポテンシャルエネルギーと力はそれぞれ

$$\overline{V}=\tfrac{1}{2}M\omega^2\overline{x}^2 \quad \text{および} \quad \overline{F}=-M\omega^2\overline{x} \tag{6.2.6}$$

であるから，式(6.2.5)で現れる後の方の指数は

$$\begin{aligned}&\cong -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{M\omega^2 t}{2}[\overline{x}^2+\overline{x}(x'+x'')]-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{M\omega^4 t^3}{24}\overline{x}^2\\ &=-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\overline{V}t+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\overline{F}t\frac{x'+x''}{2}-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{\overline{F}^2}{24M}t^3\end{aligned} \tag{6.2.7}$$

となり，求める近似式

$$\langle x',t|x''\rangle \cong \sqrt{\frac{M}{2\pi\mathrm{i}\hbar t}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{M}{2t}(x'-x'')^2}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\overline{F}t\frac{x'+x''}{2}}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{\overline{F}^2}{24M}t^3}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\overline{V}t} \tag{6.2.8}$$

を得る．この式は最後の因子を除けば，一定の力 $\overline{F}$ に対する変換関数(6.1.21)と一致する．前節での取り扱いでは，ポテンシャルエネルギー $V=-Fx$ は $x=0$ でゼロであった．この節では $x=0$ は物理的位置 $\overline{x}$ に対応し，ポテンシャルエネルギーは式(6.2.6)の $\overline{V}$ である．

無限小時間の変位に対するユニタリー演算子が $1+\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(-\delta t\,H)$ であることを思い起こそう．もし系が保存系で H が t に依存しないならば，この変位を $t/\delta t$ に等しい回数だけ繰り返すと，有限の時間 t だけ変位させるユニタリー演算子

$$\lim_{\delta t\to 0}\left(1-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\delta t\,H\right)^{t/\delta t}=\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}tH} \tag{6.2.9}$$

を得る．これは時間変換関数が

$$\langle x',t|x''\rangle=\langle x'|\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}tH}|x''\rangle \tag{6.2.10}$$

と表されることを意味する．そこで定数 $\overline{V}$ を加えて H を変えると，すでに見たように変換関数は位相 $\exp\left(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\overline{V}t\right)$ だけ変化する．このように調和ポテンシャルに対する微小時間近似の時間変換関数(6.2.8)を導いたが，ここで関与するものは参照位置 $\overline{x}$ でのポテンシャルエネルギー $\overline{V}$ と力 $\overline{F}$ であり，調和ポテンシャルとの関係は

$$\begin{aligned}V(x)=\tfrac{1}{2}M\omega^2x^2&=\tfrac{1}{2}M\omega^2\left[\overline{x}-(x-\overline{x})\right]^2\\ &=\overline{V}-\overline{F}(x-\overline{x})+\tfrac{1}{2}M\omega^2(x-\overline{x})^2\end{aligned} \tag{6.2.11}$$

である．$\overline{V}$ や $\overline{F}$ はポテンシャル $V(x)$ を用いて直接的に表すと

$$\overline{V}=V(\overline{x})\,,\qquad \overline{F}=-\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}(\overline{x})\,,\qquad M\omega^2=\frac{\mathrm{d}^2V}{\mathrm{d}x^2}(\overline{x}) \tag{6.2.12}$$

となる．位置 $\overline{x}$ の近傍において任意のポテンシャルエネルギーを近似的に記述するに当たって，これらの式を用いて $\overline{V},\overline{F},\omega^2$ を定義すると，任意の $V(x)$ の「局所振動子

近似」を得る．式(6.2.2)の前因子は $\sin(\omega t) \to \omega t$ とおいて簡単化していることに注意しよう．しかし展開 $\sin x = x - \frac{1}{6}x^3$ における第2項は，付加因子

$$1 + \frac{1}{12}\omega^2 t^2 = 1 + \frac{t^2}{12M}\frac{\mathrm{d}^2 V}{\mathrm{d}x^2}$$

によって取り込むことができる．より詳細については問題 6-16 を参照のこと．

6.3 調和振動子: エネルギー固有値

調和振動子の時間変換関数(6.1.31)に戻り，そこで $x' = x''$ とおいて x' について積分した量，すなわちトレース

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x' \left\langle x', t \middle| x' \right\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x' \left\langle x' \middle| \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Ht} \middle| x' \right\rangle = \mathrm{tr}\left\{ \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Ht} \right\}$$
$$= \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x' \sqrt{\frac{M\omega}{2\pi \mathrm{i}\hbar \sin(\omega t)}}\, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}M\omega x'^2 \tan(\frac{1}{2}\omega t)} \tag{6.3.1}$$

を求めよう．このようなガウス積分は以前にも行ったが，しかし今回は，もし $\tan(\frac{1}{2}\omega t) = 0$ すなわち $\omega t = 0, \pm 2\pi, \pm 4\pi, \ldots$ ならばこの積分は収束しないという状況になっている．それゆえに，積分は $t \to t - \mathrm{i}\epsilon$ $(\epsilon \to +0)$ という極限で定義されていると見なすことにする．すると $\tan(\frac{1}{2}\omega t) = 0$ を ϵ の一次まで展開すると

$$\tan\left(\tfrac{1}{2}\omega(t - \mathrm{i}\epsilon)\right) = \tan(\tfrac{1}{2}\omega t) - \mathrm{i}\epsilon \frac{\frac{1}{2}\omega}{\cos^2(\frac{1}{2}\omega t)} \tag{6.3.2}$$

であるから，確かに収束因子として

$$\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\frac{M\omega^2\epsilon}{8}[\cos(\frac{1}{2}\omega t)]^{-2}x'^2} \tag{6.3.3}$$

が現れる．そこで積分が実行可能となり，恒等式 $2\sin(\omega t)\tan(\frac{1}{2}\omega t) = \left(2\sin(\frac{1}{2}\omega t)\right)^2$ を用いるとトレースは

$$\mathrm{tr}\left\{ \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Ht} \right\} = \sqrt{\frac{M\omega}{2\pi \mathrm{i}\hbar \sin(\omega t)}} \sqrt{\frac{\pi\hbar}{\mathrm{i}M\omega \tan(\frac{1}{2}\omega t)}}$$
$$= \frac{1}{2\mathrm{i}\sin(\frac{1}{2}\omega t)} = \frac{1}{\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2}\omega t} - \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\omega t}} \tag{6.3.4}$$

となる．t が実際には $t - \mathrm{i}\epsilon$ であり，したがって $|\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t - \mathrm{i}\epsilon)}| = \mathrm{e}^{-\epsilon\omega} < 1$ となることをこの時点で思い出すと，トレースは

$$\mathrm{tr}\left\{ \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Ht} \right\} = \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\omega t}}{1 - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}} = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\omega t} \sum_{n=0}^{\infty} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\omega t} = \sum_{n=0}^{\infty} \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(n + \frac{1}{2})\hbar\omega t} \tag{6.3.5}$$

と展開できることがわかる．次に，H の固有値を E，その多重度を $m(E)$ としてトレースを展開した式

$$\mathrm{tr}\left\{\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Ht}\right\} = \sum_E m(E)\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et} \tag{6.3.6}$$

と比較することで，調和振動子のエネルギー固有値とその多重度が

$$E = (n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega\,, \qquad n = 0,1,\dots\,, \qquad m(E) = 1 \tag{6.3.7}$$

であると結論できる．

もちろん我々は $n+\frac{1}{2}$ についてはよく知っている．ハミルトニアンを

$$H = \frac{p_x^2}{2M} + \frac{M\omega^2}{2}x^2 \tag{6.3.8}$$

とし，以下のように無次元の変数 q, p を導入する．

$$x = \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}}\,q\,, \qquad p_x = \sqrt{M\hbar\omega}\,p\,, \qquad \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[x,p_x] = \frac{1}{\mathrm{i}}[q,p] = 1\,. \tag{6.3.9}$$

これらの変数をハミルトニアン(6.3.8)に代入するとハミルトニアン及び固有値は

$$H = \hbar\omega\frac{p^2+q^2}{2}\,, \qquad \text{および} \qquad \left(\frac{p^2+q^2}{2}\right)' = n+\tfrac{1}{2} \tag{6.3.10}$$

となることは 2.4 節で求めている．実際，そこで議論された停留不確定性の状態 $|n\rangle$ は純粋に運動学的な基礎の上に特徴付けられていたが，ここではこの状態は調和振動子のエネルギー固有状態であるという等価な力学的特徴付けをすることができるようになった．この点に関しては 6.5 節で再び論じる．

6.4　自由粒子と一定の力: 状態密度

自由粒子の場合と一定の力の場合にトレース計算を行うと，どのようになるだろうか？ 自由粒子の時間変換関数(6.1.11)で $x' = x''$ とすると

$$\langle x', t | x' \rangle = \sqrt{\frac{M}{2\pi\mathrm{i}\hbar t}} \tag{6.4.1}$$

となり，この結果はあまり役に立つとは思えないかもしれない．しかし

$$\langle x', t | x'' \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}x'p'}\,\mathrm{d}p'\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p'^2}{2M}t}\,\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p'x''} \tag{6.4.2}$$

と表せることを思い出すことは助けになる．ここで $x' = x''$ とすると

$$\langle x', t | x' \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}p'}{2\pi\hbar}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p'^2}{2M}t} \tag{6.4.3}$$

となり，p' についての積分を実行すれば再び上記の結果を得る．トレース計算を行うと (x' を x と記す)

$$\mathrm{tr}\left\{\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Ht}\right\} = \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\,\langle x, t | x \rangle = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}x\,\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et} \tag{6.4.4}$$

と表される．ただし，ここで

$$E = \frac{p^2}{2M} \tag{6.4.5}$$

であり，H のスペクトルが $0 \le E < \infty$ であることを明確に示している．さらに古典的位相空間において $2\pi\hbar$ と等しい積分範囲 $\mathrm{d}x\,\mathrm{d}p$ が，1 つの量子状態に対応することを理解できる(3 次元では，1 つの量子状態は $(2\pi\hbar)^3$ に等しい積分範囲 $(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,(\mathrm{d}\boldsymbol{p})$ に対応する)．もっと正確に記述するためには，大きいけれども有限の x の範囲($\int \mathrm{d}x \to L$)をまず考える．次に 1 つのエネルギーには正と負の p が対応することを考慮すると

$$\mathrm{d}p \to 2\mathrm{d}\sqrt{2ME} = \mathrm{d}E\sqrt{\frac{2M}{E}} \tag{6.4.6}$$

となるから，トレースは

$$\mathrm{tr}\left\{\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Ht}\right\}_L = \int_0^\infty \mathrm{d}E\,\frac{L}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{2M}{E}}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et} \tag{6.4.7}$$

と表される．これよりわかるように，

$$m_L(E) = \frac{L}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{2M}{E}} \tag{6.4.8}$$

は距離 L の範囲にある単位エネルギー当たりの状態数を表している．したがって

$$\frac{\partial}{\partial L}m_L(E) = \frac{1}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{2M}{E}} \tag{6.4.9}$$

は，**状態密度**すなわち単位エネルギーおよび単位長さ(x)当たりの状態数である．

同様に，一定の力の場合の時間変換関数(6.1.21)を書き直すと

$$\begin{aligned}\langle x, t|x\rangle &= \sqrt{\frac{M}{2\pi\mathrm{i}\hbar t}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Fxt}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{F^2t^3}{24M}} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2M}-Fx\right)t}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{F^2t^3}{24M}}\end{aligned} \tag{6.4.10}$$

となる．ここで現れた因子

$$\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{F^2t^3}{24M}} = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{3}\tau^3}\,, \qquad \tau = \frac{1}{2}t\left(\frac{F^2}{M\hbar}\right)^{\frac{1}{3}} \tag{6.4.11}$$

についてはどのように扱えばよいだろうか？ この因子をフーリエ積分で表して

$$\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{3}\tau^3} = \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\sigma\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\sigma\tau}\,\mathrm{Ai}(\sigma) \tag{6.4.12}$$

とすると，ここで現れる関数は

$$\mathrm{Ai}(\sigma) = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\tau}{2\pi}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\sigma\tau}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{3}\tau^3} = \frac{1}{\pi}\int_0^\infty \mathrm{d}\tau\,\cos\left(\sigma\tau + \tfrac{1}{3}\tau^3\right) \tag{6.4.13}$$

と表され，エアリー*関数と呼ばれている．この関数は簡単な微分方程式に従い，それ

*Sir George Bidell AIRY (1801–1892)

は以下のように部分積分により容易に導出できる．すなわち

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\sigma^2}\,\mathrm{Ai}(\sigma) &= -\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\tau}{2\pi}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\sigma\tau}\,\tau^2\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{3}\tau^3}\\ &= -\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\tau}{2\pi}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\sigma\tau}\,\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial\tau}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{3}\tau^3}\\ &= \sigma\,\mathrm{Ai}(\sigma)\,. \end{aligned} \tag{6.4.14}$$

さらに式(6.4.12)で $\tau=0$ とすればわかるように，エアリー関数の積分は

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\sigma\,\mathrm{Ai}(\sigma)=1 \tag{6.4.15}$$

と1に規格化されている．以上よりトレースは

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}\left\{\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Ht}\right\} &= \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}x\,\langle x,t|x\rangle\\ &= \int\frac{\mathrm{d}x\,\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}\int\mathrm{d}\sigma\,\mathrm{Ai}(\sigma)\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2M}-Fx-\frac{\sigma}{2M}(\hbar MF)^{\frac{2}{3}}\right)t} \end{aligned} \tag{6.4.16}$$

であることがわかった．ここで新しい変数 E を

$$E=\frac{p^2}{2M}-Fx-\frac{\sigma}{2M}(\hbar MF)^{\frac{2}{3}} \tag{6.4.17}$$

と定義すると，p との関係は

$$\frac{p\mathrm{d}p}{M}=\mathrm{d}E\,,\qquad p=\pm\sqrt{2ME+2MFx+\sigma(\hbar MF)^{\frac{2}{3}}} \tag{6.4.18}$$

となる．したがってトレースは

$$\begin{aligned}\mathrm{tr}\left\{\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Ht}\right\} &= \int\mathrm{d}E\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}\int\mathrm{d}\sigma\,\mathrm{Ai}(\sigma)\\ &\quad\times\int\frac{\mathrm{d}x}{\pi\hbar}\frac{M}{\sqrt{2ME+2MFx+\sigma(\hbar MF)^{\frac{2}{3}}}} \end{aligned} \tag{6.4.19}$$

となる．ここで E, σ および x による積分は，平方根の中の変数が正となる範囲内で実行する．このトレースの式で $F=0$ とすると，積分(6.4.15)を用いて計算すると自由粒子のトレースの式(6.4.7)に一致するという当然の結果を得る．

次に $F>0$ と仮定し，平方根の中の変数がゼロとなる値から大きな正の値 L まで x で積分すると

$$\begin{aligned}&\int^{L}\frac{\mathrm{d}x}{\pi\hbar}\frac{M}{\sqrt{2ME+2MFx+\sigma(\hbar MF)^{\frac{2}{3}}}}\\ &\quad=\int^{L}\frac{\mathrm{d}x}{\pi\hbar F}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\mathrm{d}\sqrt{2ME+2MFx+\sigma(\hbar MF)^{\frac{2}{3}}}\\ &\quad=\frac{1}{\pi\hbar}\sqrt{\frac{2ML}{F}}\sqrt{1+\frac{E}{FL}+\frac{\sigma}{2L}\left(\frac{\hbar^2}{MF}\right)^{\frac{2}{3}}} \end{aligned} \tag{6.4.20}$$

となる．L が非常に大きく

$$L \gg \frac{|E|}{F} \quad \text{および} \quad L \gg \left(\frac{\hbar^2}{MF}\right)^{\frac{1}{3}} \tag{6.4.21}$$

が成り立つとし，値がオーダー 1 の σ のみが重要な寄与をすることを考慮すると(洗練された取り扱いについては，問題 6-29 を参照)，トレースが

$$\mathrm{tr}\left\{\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Ht}\right\}_L = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}E\; m_L(E)\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}$$

$$\text{ただし} \quad m_L(E) \cong \frac{1}{\pi\hbar}\sqrt{\frac{2ML}{F}} \tag{6.4.22}$$

で与えられることがわかる．したがって状態密度は

$$\frac{\partial}{\partial L} m_L(E) \cong \frac{1}{\pi\hbar}\sqrt{\frac{M}{2FL}} \tag{6.4.23}$$

となり，E の範囲は $-\infty < E < \infty$ である．自由粒子の場合($F = 0$)には式(6.4.8)に $1/\sqrt{E}$ が現れ $E < 0$ を排除しているが，一定の力の場合では E についてそのような制限がない．

この一定の力に対するエネルギースペクトルの性質は以下のように容易に理解できる．ハミルトニアン(6.1.12)が与えられたとすると，変位 $x \to x + x_0$ を実行すると等価なハミルトニアン

$$H = \frac{p^2}{2M} - Fx - Fx_0 \tag{6.4.24}$$

を得る．明らかに $p^2/(2M) - Fx$ のスペクトルは下限を持たない．なぜならもし下限があるとすると，$Fx_0 > 0$ と選ぶことでさらに低い下限を得るからである．上限がないことも同様に証明できる．

6.5　調和振動子: エネルギー固有状態

時間発展を記述するハミルトニアン H の重要性を考えると，その固有値だけでなく固有ベクトルにも注意を向けることは自然であろう．これらの情報すべては時間変換関数の中にある．エネルギー E の固有ベクトルを多重度の可能性も考慮して E, γ とラベルを付けると，時間発展演算子は

$$\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Ht} = \sum_{E,\gamma} \big|E,\gamma\big\rangle\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}\big\langle E,\gamma\big| \tag{6.5.1}$$

と展開できる．すると時間変換関数は

$$
\begin{aligned}
\langle q',t|q''\rangle &= \langle q'|\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Ht}|q''\rangle \\
&= \sum_{E,\gamma} \underbrace{\langle q'|E,\gamma\rangle}_{=\psi_{E,\gamma}(q')}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}\,\underbrace{\langle E,\gamma|q''\rangle}_{=\psi_{E,\gamma}(q'')^*}
\end{aligned}
\tag{6.5.2}
$$

となり，q 表示の波動関数を同定することができる．したがって時間変換関数を知ることで H のすべての固有値と固有関数がわかる．すでに示したように，トレースは固有値のみに興味を限定した特殊な応用であり，次のように表される．

$$
\begin{aligned}
\mathrm{tr}\left\{\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Ht}\right\} &= \int \mathrm{d}q'\,\langle q'|\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Ht}|q'\rangle \\
&= \sum_{E,\gamma}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}\int \mathrm{d}q'\,\left|\psi_{E,\gamma}(q')\right|^2 \\
&= \sum_{E,\gamma}\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et} = \sum_{E} m(E)\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}\,.
\end{aligned}
\tag{6.5.3}
$$

離散的なスペクトルを持つ振動子を用いて上記の展開を例示しよう．出発点は式(6.1.31)であり，無次元の変数 $q=\sqrt{M\omega/\hbar}\,x$ を用いて次のように表すことができる．

$$
\begin{aligned}
\langle q',t|q''\rangle &\equiv \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}}\,\langle x',t|x''\rangle \\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi\mathrm{i}\sin(\omega t)}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2\sin(\omega t)}[(q'^2+q''^2)\cos(\omega t)-2q'q'']} \\
&= \frac{\pi^{-\frac{1}{2}}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\omega t}}{\sqrt{1-\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega t}}}\,\mathrm{e}^{\frac{1}{2}(q'^2+q''^2)} \\
&\qquad\times\,\mathrm{e}^{-(1-\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega t})^{-1}(q'^2+q''^2-2q'q''\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t})}\,.
\end{aligned}
\tag{6.5.4}
$$

上の式の最後の因子は2変数のガウス関数であり，これを2重フーリエ積分で表すと便利である．

そのためにすこし寄り道して n-次元のユークリッド型フーリエ積分

$$
\int(\mathrm{d}u)\,\mathrm{e}^{-u^{\mathrm{T}}Au+2\mathrm{i}u^{\mathrm{T}}\phi} = \int(\mathrm{d}u)\,\mathrm{e}^{-u^{\mathrm{T}}Au+\mathrm{i}u^{\mathrm{T}}\phi+\mathrm{i}\phi^{\mathrm{T}}u}
\tag{6.5.5}
$$

を考えることにする．ここで u と ϕ は実 n-成分縦ベクトル($u_k=u_k^*,\phi_k=\phi_k^*$)，$A$ は実正定値対称 $n\times n$ 行列($A_{kl}=A_{lk}=A_{kl}^*$)であり，指数にある積は

$$
u^{\mathrm{T}}Au=\sum_k u_kA_{kl}u_l\,,\qquad u^{\mathrm{T}}\phi=\sum_l u_l\phi_l=\phi^{\mathrm{T}}u
\tag{6.5.6}
$$

を表していることは自明であろう．平方完成した後 $u\to u+\mathrm{i}A^{-1}\phi$ と変数変換すると，この積分は

$$\int(\mathrm{d}u)\ \mathrm{e}^{-(u-\mathrm{i}A^{-1}\phi)^{\mathrm{T}}A(u-\mathrm{i}A^{-1}\phi)}\,\mathrm{e}^{-\phi^{\mathrm{T}}A^{-1}\phi}$$
$$=\int(\mathrm{d}u)\ \mathrm{e}^{-u^{\mathrm{T}}Au}\,\mathrm{e}^{-\phi^{\mathrm{T}}A^{-1}\phi} \tag{6.5.7}$$

となる．そこで行列 A の固有ベクトルの張る座標系へ座標変換して積分すると

$$\int(\mathrm{d}u)\ \mathrm{e}^{-u^{\mathrm{T}}Au}=\prod_k\int \mathrm{d}u_k\ \mathrm{e}^{-A_k u_k^2}=\prod_k\sqrt{\frac{\pi}{A_k}}=\frac{\pi^{\frac{1}{2}n}}{\sqrt{\det A}} \tag{6.5.8}$$

となり，求める公式

$$\int(\mathrm{d}u)\ \mathrm{e}^{-u^{\mathrm{T}}Au+2\mathrm{i}u^{\mathrm{T}}\phi}=\frac{\pi^{\frac{1}{2}n}}{\sqrt{\det A}}\,\mathrm{e}^{-\phi^{\mathrm{T}}A^{-1}\phi} \tag{6.5.9}$$

に達する．

この公式を用いるために式(6.5.4)で現れた 2 次元ガウス関数の指数部分を以下のように表そう．

$$\phi^{\mathrm{T}}A^{-1}\phi=\begin{pmatrix}q'\\ q''\end{pmatrix}^{\mathrm{T}}\begin{pmatrix}\dfrac{1}{1-\lambda^2} & -\dfrac{\lambda}{1-\lambda^2}\\ -\dfrac{\lambda}{1-\lambda^2} & \dfrac{1}{1-\lambda^2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}q'\\ q''\end{pmatrix}$$
$$=\left(q',q''\right)\begin{pmatrix}1 & \lambda\\ \lambda & 1\end{pmatrix}^{-1}\begin{pmatrix}q'\\ q''\end{pmatrix}\qquad \text{ただし}\quad \lambda\equiv \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\,. \tag{6.5.10}$$

さらに

$$\det\begin{pmatrix}1 & \lambda\\ \lambda & 1\end{pmatrix}=1-\lambda^2 \tag{6.5.11}$$

を考慮し上記の公式を用いると，時間変換関数は(比例係数を除いて)

$$\frac{1}{\sqrt{1-\lambda^2}}\,\mathrm{e}^{-(q'^2+q''^2-2\lambda q'q'')/(1-\lambda^2)}$$
$$=\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}u_1\mathrm{d}u_2\,\mathrm{e}^{-u_1^2-u_2^2-2\lambda u_1u_2+2\mathrm{i}(u_1q'+u_2q'')} \tag{6.5.12}$$

と 2 重積分で表される．$e^{-2\lambda u_1u_2}$ を展開してこの式を再配列すると

$$\frac{1}{\pi}\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\left(\frac{1}{2}\lambda\right)^n}{n!}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}u_1\mathrm{d}u_2\,(-2\mathrm{i}u_1)^n(-2\mathrm{i}u_2)^n\,\mathrm{e}^{-u_1^2-u_2^2+2\mathrm{i}u_1q'+2\mathrm{i}u_2q''}$$
$$=\sum_{n=0}^{\infty}\frac{\left(\frac{1}{2}\lambda\right)^n}{n!}\left(-\frac{\partial}{\partial q'}\right)^n\left(-\frac{\partial}{\partial q''}\right)^n\underbrace{\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}u_1\mathrm{d}u_2\,\mathrm{e}^{-u_1^2-u_2^2+2\mathrm{i}u_1q'+2\mathrm{i}u_2q''}}_{=\,\mathrm{e}^{-q'^2-q''^2}}$$
$$=\sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n\frac{1}{2^n n!}\mathrm{H}_n(q')\mathrm{H}_n(q'')\,\mathrm{e}^{-q'^2-q''^2} \tag{6.5.13}$$

となり，エルミートの多項式 (2.5.4) が現れた．これらをまとめると

$$\left\langle q', t \middle| q'' \right\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \psi_n(q')\, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_n t} \psi_n(q'')^* \tag{6.5.14}$$

となる．ここで

$$E_n = \hbar\omega\left(n + \tfrac{1}{2}\right) \tag{6.5.15}$$

は式(6.3.7)のエネルギー固有値であり，

$$\psi_n(q') = \frac{\pi^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{2^n n!}} \mathrm{H}_n(q')\, \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q'^2}\,, \qquad \psi_n(x') = \left(\frac{M\omega}{\hbar}\right)^{\frac{1}{4}} \psi_n(q') \tag{6.5.16}$$

は式(2.5.5)の波動関数そのものである．

すでに知っている結果に再び戻るためのこの大層な議論はいったいどうしたことか，もっと簡単な方法があるに違いないと読者は思うであろう．確かにその方法はあるし，それは非エルミート演算子を用いた方法であるが，このことは驚くほどのことではない．しかしこの方法について考える前に(7.1 節を見よ)，自由粒子および一定の力のもとで運動する粒子の波動関数を調べてみよう．

6.6　自由粒子と一定の力: エネルギー固有状態

自由粒子の時間変換関数は，すでに知っているように

$$\left\langle x, t \middle| x' \right\rangle = \int \frac{\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}xp}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, \mathrm{d}p\, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^2}{2M}t}\, \frac{\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}px'}}{\sqrt{2\pi\hbar}} \tag{6.6.1}$$

であるが(すなわち式(6.4.2))，これを $E = p^2/(2M)$, $\mathrm{d}E = (p/M)\mathrm{d}p$ を用いて書き換えよう．与えられた E に対して 2 つの p，すなわち $p = \pm\sqrt{2ME}$ が対応する(今後，p は正の値とする)．すると

$$\left\langle x, t \middle| x' \right\rangle = \sum_{\gamma=\pm} \int_0^{\infty} \mathrm{d}E\, \psi_{E,\gamma}(x)\, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et} \psi_{E,\gamma}(x')^* \tag{6.6.2}$$

と展開できる．ここで 2 つの波動関数

$$\begin{aligned} \psi_{E,\pm}(x) &= \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}} \sqrt{\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}E}}\, \mathrm{e}^{\pm\frac{\mathrm{i}}{\hbar}xp} \\ &= \frac{(2E/M)^{-\frac{1}{4}}}{\sqrt{2\pi\hbar}}\, \mathrm{e}^{\pm\frac{\mathrm{i}}{\hbar}x\sqrt{2ME}} \end{aligned} \tag{6.6.3}$$

は同じエネルギーを持ち，粒子が右(+)または左(−)に運動している 2 つの状態を表している．

問題 6-6 からわかるように，一定の力 $F > 0$ では p 表示の時間変換関数は

$$\left\langle p, t \middle| p' \right\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^3}{6MF}}\, \delta(p - p' - Ft)\, \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p'^3}{6MF}} \tag{6.6.4}$$

である．デルタ関数は

$$\delta(p-p'-Ft)=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}E}{2\pi\hbar F}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{E}{F}(p-p'-Ft)} \tag{6.6.5}$$

と表されるから，変換関数は

$$\langle p,t|p'\rangle=\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}E\;\psi_E(p)\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}\,\psi_E(p')^* \tag{6.6.6}$$

と展開される．ここで

$$\psi_E(p)=\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar F}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar F}(Ep-\frac{p^3}{6M})} \tag{6.6.7}$$

である．

$F\to 0$ ではどのようになるだろうか？ 運動量 p の関数として考えたとき，$\psi_E(p)$ はこの極限で無限に速く振動するが，ただし例外は

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}p}\left(Ep-\frac{p^3}{6M}\right)=E-\frac{p^2}{2M}=0 \tag{6.6.8}$$

を満たす場合で，$E>0$ でのみ解を持つ．これは自由粒子のスペクトルに戻ったことを意味する．波動関数に対しても同様の状況が現れることを確かめる課題は，問題 6-31 に残すことにする．

$\psi_E(p)$ が与えられると，$\psi_E(x)$ は

$$\begin{aligned}\psi_E(x)&=\int_{-\infty}^{\infty}\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}xp}\,\mathrm{d}p\,\frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar F}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar F}(Ep-\frac{p^3}{6M})}\\&=\frac{1}{2\pi\hbar}\frac{1}{\sqrt{F}}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}p\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar F}(E+Fx)p}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar F}\frac{p^3}{6M}}\end{aligned} \tag{6.6.9}$$

と表される．ここで変数変換

$$p=(2M\hbar F)^{\frac{1}{3}}\tau \tag{6.6.10}$$

を行うと，

$$\begin{aligned}\psi_E(x)&=\left(\frac{2M}{\hbar^2\sqrt{F}}\right)^{\frac{1}{3}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\tau}{2\pi}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\,(2MF/\hbar^2)^{\frac{1}{3}}\,(-x-E/F)\,\tau}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{3}\tau^3}\\&=\left(\frac{2M}{\hbar^2\sqrt{F}}\right)^{\frac{1}{3}}\,\mathrm{Ai}\big((2MF/\hbar^2)^{\frac{1}{3}}(-x-E/F)\big)\end{aligned} \tag{6.6.11}$$

とエアリー関数で表される．この波動関数は正規直交で完全である（問題 6-25 を参照）．

規格化因子を別にしてエアリー関数が現れることは，エネルギー固有状態に対するシュレーディンガーの微分方程式から理解することができる．方程式

$$\langle q'|H(q,p)|E,\gamma\rangle=H\Big(q',\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial q'}\Big)\langle q'|E,\gamma\rangle=\langle q'|E,\gamma\rangle E \tag{6.6.12}$$

は，しばしば時間独立なシュレーディンガー方程式と呼ばれ

$$\left[E - H\left(q', \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial q'}\right)\right] \psi_{E,\gamma}(q') = 0 \tag{6.6.13}$$

となる．一定の力の場合には

$$\left(E + \frac{\hbar^2}{2M}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + Fx\right) \psi_E(x) = 0 \tag{6.6.14}$$

と表される．これを方程式(6.4.14)

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\sigma^2} - \sigma\right) \mathrm{Ai}(\sigma) = 0 \tag{6.6.15}$$

と比較すると，式(6.6.11)でのエアリー関数の変数が確かに

$$\sigma = \left(2MF/\hbar^2\right)^{\frac{1}{3}} (-x - E/F) \tag{6.6.16}$$

であることが理解できる．

6.7　一定の力: 漸近的波動関数

エアリー関数 $\mathrm{Ai}(\sigma)$ は σ が負で(絶対値が)十分に大きい場合には振動し，σ が正で十分に大きい場合には指数関数的に振る舞うことは，微分方程式(6.6.15)から一般的な方法で簡単に理解できる．これらの漸近的な振る舞いについてもう少し正確な議論をしよう．

最初に大きな負の σ の値 $-\sigma \gg 1$ を考える．積分表示

$$\mathrm{Ai}(\sigma) = \frac{1}{\pi}\,\mathrm{Re}\left(\int_0^\infty \mathrm{d}\tau\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}(|\sigma|\tau - \frac{1}{3}\tau^3)}\right) \tag{6.7.1}$$

において，位相の停留値は式

$$0 = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\left(|\sigma|\tau - \frac{1}{3}\tau^3\right) = |\sigma| - \tau^2\,, \qquad \text{ゆえに}\quad \tau = \sqrt{|\sigma|} = \sqrt{-\sigma} \tag{6.7.2}$$

で決まる．実際，この値で位相が最大値を持つことは

$$\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\tau^2}\left(|\sigma|\tau - \frac{1}{3}\tau^3\right) = -\tau \cong -\sqrt{|\sigma|} \tag{6.7.3}$$

よりわかる．この値の周りで位相を 2 次の項まで展開すると

$$\begin{aligned}\tau \to \sqrt{-\sigma} + \tau\,, \quad |\sigma|\tau - \tfrac{1}{3}\tau^3 &\to (-\sigma)\left(\sqrt{-\sigma} + \tau\right) - \tfrac{1}{3}\left(\sqrt{-\sigma} + \tau\right)^3 \\ &\cong \tfrac{2}{3}(-\sigma)^{\frac{3}{2}} - \sqrt{-\sigma}\,\tau^2\end{aligned} \tag{6.7.4}$$

となり，これを積分表示に代入し積分すると

$$\begin{aligned}\mathrm{Ai}(\sigma) &\cong \frac{1}{\pi}\,\mathrm{Re}\left(\int_{-\sqrt{-\sigma}\cong-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{2}{3}(-\sigma)^{\frac{3}{2}}}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\sqrt{-\sigma}\tau^2}\right)\\ &\cong \frac{1}{\pi}\,\mathrm{Re}\left(\sqrt{\frac{\pi}{\mathrm{i}\sqrt{-\sigma}}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{2}{3}(-\sigma)^{\frac{3}{2}}}\right)\\ &= \pi^{-\frac{1}{2}}(-\sigma)^{-\frac{1}{4}}\cos\left(\frac{2}{3}(-\sigma)^{\frac{3}{2}} - \frac{\pi}{4}\right)\end{aligned} \tag{6.7.5}$$

となり，$-\sigma \gg 1$ での漸近展開の主要項が求まった．

$\sigma = 0$ でのエアリー関数の値

$$\mathrm{Ai}(0) = \frac{1}{\pi}\,\mathrm{Re}\left(\int_0^{\infty} \mathrm{d}\tau\, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{3}\tau^3}\right) \tag{6.7.6}$$

を求めるには，$\tau = 3^{\frac{1}{3}}\,\mathrm{e}^{-\frac{\pi\mathrm{i}}{6}} y^{\frac{1}{3}}$ と置き換えて積分して

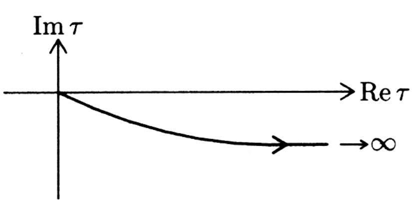
$$\begin{aligned}\mathrm{Ai}(0) &= \frac{1}{\pi}\mathrm{Re}\Bigl(3^{-\frac{2}{3}}\,\mathrm{e}^{-\frac{\pi\mathrm{i}}{6}} \underbrace{\int_0^{\infty} \mathrm{d}y\, y^{-\frac{2}{3}}\, \mathrm{e}^{-y}}_{=(-\frac{2}{3})! = 2.678\,939}\Bigr)\\ &= \frac{3^{-\frac{1}{6}}}{2\pi}\left(-\frac{2}{3}\right)! = 0.3550\end{aligned} \tag{6.7.7}$$

と求まる．

次に大きな正の σ の値 $\sigma \gg 1$ に移ろう．積分表示

$$\mathrm{Ai}(\sigma) = \frac{1}{\pi}\,\mathrm{Re}\left(\int_0^{\infty} \mathrm{d}\tau\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\sigma\tau + \frac{1}{3}\sigma^3)}\right) \tag{6.7.8}$$

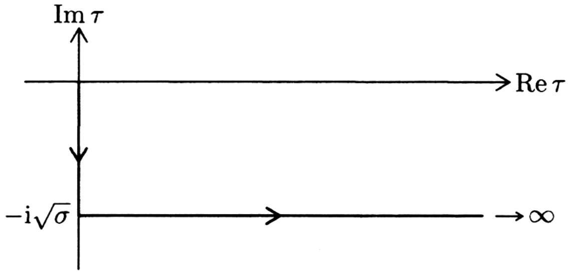
が $\tau = \infty$ で収束するためには，τ が負の虚部を持つ必要があることに直ちに気が付くだろう．すなわち積分経路は実軸の下を走らなければならない．この経路の例を下図に描いてみる．



次に，被積分関数の指数が停留点を持っていることに注意しよう．実際

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\left(\sigma\tau + \frac{1}{3}\tau^3\right) = \sigma + \tau^2 = 0 \quad より \quad \tau = -\mathrm{i}\sqrt{\sigma} \tag{6.7.9}$$

が停留点である．そこで積分経路を下図のように選ぶことにする．



経路の最初の部分を $\tau = -\mathrm{i}v$ $(v: 0 \to \sqrt{\sigma})$ とパラメータで表すと，この経路上での積分は

$$\frac{1}{\pi}\,\mathrm{Re}\left(\int_0^{\sqrt{\sigma}} (-\mathrm{i})\mathrm{d}v\ \mathrm{e}^{-(\sigma v - \frac{1}{3}v^3)}\right) = 0 \tag{6.7.10}$$

となり寄与がないことがわかる．積分経路の残りを $\tau = -\mathrm{i}\sqrt{\sigma} + u$ $(u: 0 \to \infty)$ と表すと，$\sigma \gg 1$ に対しては

$$\begin{aligned}\mathrm{Ai}(\sigma) &\cong \frac{1}{\pi}\,\mathrm{Re}\left(\int_0^{\infty} \mathrm{d}u\ \mathrm{e}^{-\frac{2}{3}\sigma^{\frac{3}{2}}}\ \mathrm{e}^{-\sqrt{\sigma}u^2}\right)\\ &= \frac{1}{\pi}\,\mathrm{e}^{-\frac{2}{3}\sigma^{\frac{3}{2}}} \underbrace{\int_0^{\infty} \mathrm{d}u\ \mathrm{e}^{-\sqrt{\sigma}u^2}}_{=\frac{1}{2}\sqrt{\pi/\sqrt{\sigma}}}\\ &= \frac{1}{2}\pi^{-\frac{1}{2}}\sigma^{-\frac{1}{4}}\,\mathrm{e}^{-\frac{2}{3}\sigma^{\frac{3}{2}}}\end{aligned} \tag{6.7.11}$$

となり，これが $\sigma \gg 1$ における漸近展開の主要項である．

ここで式(6.6.16)で与えられた σ の表現を代入すると，$\psi_E(x)$ の漸近形は

$$\begin{aligned}\psi_E(x) &\cong \pi^{-\frac{1}{2}}\frac{\left(2M/\hbar^2\right)^{\frac{1}{4}}}{(E+Fx)^{\frac{1}{4}}}\cos\left(\frac{2}{3}\left(2M/\hbar^2\right)^{\frac{1}{2}}\frac{1}{F}(E+Fx)^{\frac{3}{2}} - \frac{\pi}{4}\right)\\ &\text{ただし}\quad E + Fx \gg \left[\hbar^2F^2/(2M)\right]^{\frac{1}{3}}\end{aligned} \tag{6.7.12}$$

および

$$\begin{aligned}\psi_E(x) &\cong \frac{1}{2}\pi^{-\frac{1}{2}}\frac{\left(2M/\hbar^2\right)^{\frac{1}{4}}}{|E+Fx|^{\frac{1}{4}}}\,\mathrm{e}^{-\frac{2}{3}(2M/\hbar^2)^{\frac{1}{2}}\frac{1}{F}|E+Fx|^{\frac{3}{2}}}\\ &\text{ただし}\quad -(E+Fx) \gg \left[\hbar^2F^2/(2M)\right]^{\frac{1}{3}}\end{aligned} \tag{6.7.13}$$

となる．これらの結果をもっと簡潔で一般的な形で表す手続きを以下で実行しよう．まず $E + Fx = E - (-Fx)$ は**古典的**な運動エネルギー $p^2/(2M)$ であるから，

$$p(x) = \sqrt{2M(E+Fx)} \tag{6.7.14}$$

はエネルギーが E での位置 x における古典的運動量である．この表式を用いると

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left[\frac{2}{3F}(E+Fx)^{\frac{3}{2}}\right]=(E+Fx)^{\frac{1}{2}}=\frac{p(x)}{\sqrt{2M}} \tag{6.7.15}$$

となり，積分すると

$$\sqrt{2M}\frac{2}{3F}(E+Fx)^{\frac{3}{2}}=\int_{-E/F}^{x}\mathrm{d}x'\,p(x') \tag{6.7.16}$$

となる．これらを $E+Fx>0$ の場合に用いると，式(6.7.12)は

$$E+Fx>0:\quad \psi_E(x)\cong\sqrt{\frac{2M}{\pi\hbar p(x)}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{p=0}^{x}\mathrm{d}x'\,p(x')-\frac{\pi}{4}\right) \tag{6.7.17}$$

と表すことができる．

$E+Fx<0$ の場合には $p(x)$ は純虚数である．なぜならこの領域が古典的に禁止されているからである．波動関数はこの領域に進入すると急速に減少するが，しかしゼロにはならない．そこで

$$|p(x)|=\sqrt{2M(-E-Fx)} \tag{6.7.18}$$

と記すと，この積分は

$$\begin{aligned}\int_{p=0}^{x}\mathrm{d}x'\,|p(x')| &= (2M)^{\frac{1}{2}}\int_{-E/F}^{x}\mathrm{d}x'\,(-E-Fx)^{\frac{1}{2}}\\ &= -(2M)^{\frac{1}{2}}\frac{2}{3F}(-E-Fx)^{\frac{3}{2}}\end{aligned} \tag{6.7.19}$$

となるから，式(6.7.13)は

$$E+Fx<0:\quad \psi_E(x)\cong\frac{1}{2}\sqrt{\frac{2M}{\pi\hbar p(x)}}\,\mathrm{e}^{\frac{1}{\hbar}\int_{p=0}^{x}\mathrm{d}x'\,|p(x')|} \tag{6.7.20}$$

と表すことができる．

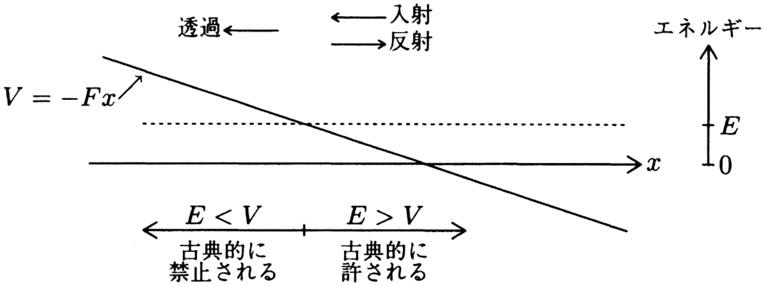
これらの漸近的な波動関数を物理的に解釈するために，まず最初に波動関数を次のように書き表そう．

$$\psi_E\cong\frac{1}{2}\left(\frac{2M}{\pi\hbar p}\right)^{\frac{1}{2}}\Bigg[\underbrace{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(\frac{1}{\hbar}\int_{p=0}^{x}\mathrm{d}x'\,p(x')-\frac{\pi}{4}\right)}}_{\text{入射波}}+\underbrace{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\frac{1}{\hbar}\int_{p=0}^{x}\mathrm{d}x'\,p(x')-\frac{\pi}{4}\right)}}_{\text{反射波}}\Bigg]$$

$$\text{ただし}\quad x>-E/F\,,$$

$$\psi_E\cong\frac{1}{2}\left(\frac{2M}{\pi\hbar p}\right)^{\frac{1}{2}}\underbrace{\mathrm{e}^{\frac{1}{\hbar}\int_{p=0}^{x}\mathrm{d}x'\,|p(x')|}}_{\text{透過波}}\qquad\text{ただし}\quad x<-E/F\,. \tag{6.7.21}$$

対応する状況は下図に描かれている．



入射波は古典的に許される領域を左方向に運動し，条件 $E - V(x) = E + Fx = 0$ で決まるこの領域の境界に突き当たる．この境界で入射波と等しい振幅を持つ波が生成され，古典的に許される領域へと跳ね返ってくる．これが反射波である．さらに古典的に禁止される領域へと進入する指数関数的に減少する波がある．これが透過波である．

透過波の波動関数 $\psi_{\text{trans.}}$ と反射波の波動関数 $\psi_{\text{refl.}}$ はともに，入射波の波動関数

$$\psi_{\text{inc.}}(x) = \frac{1}{2}\left(\frac{2M}{\pi\hbar p(x)}\right)^{\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(\frac{1}{\hbar}\int_{p=0}^{x}\mathrm{d}x'\,p(x') - \frac{\pi}{4}\right)} \tag{6.7.22}$$

から，以下のように $p(x)$ の簡単な置き換えで得ることができる．まず置き換え

$$p(x) \to \mathrm{e}^{\frac{\pi\mathrm{i}}{2}}|p(x)| = \mathrm{i}|p(x)| \tag{6.7.23}$$

は，$\psi_{\text{inc.}}$ を $\psi_{\text{trans.}}$ に

$$\psi_{\text{inc.}}(x) \to \frac{1}{2}\left(\frac{2M}{\pi\hbar p(x)}\right)^{\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{\int_{p=0}^{x}\mathrm{d}x'\,|p(x')|} = \psi_{\text{trans.}}(x) \tag{6.7.24}$$

と変え，さらに置き換え

$$p(x) \to \mathrm{e}^{\pi\mathrm{i}}p(x) = -p(x) \tag{6.7.25}$$

は $\psi_{\text{inc.}}$ を $\psi_{\text{refl.}}$ に

$$\psi_{\text{inc.}}(x) \to \frac{1}{2}\left(\frac{2M}{\pi\hbar p(x)}\right)^{\frac{1}{2}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(\frac{1}{\hbar}\int_{p=0}^{x}\mathrm{d}x'\,p(x') - \frac{\pi}{4}\right)} = \psi_{\text{refl.}} \tag{6.7.26}$$

と変える．入射波と反射波の波動関数の位相 $\pm\pi/4$ のおかげで，これ以外の付加的な位相因子は必要ではないことに注意しよう．$\psi_{\text{inc.}}$ を $\psi_{\text{trans.}}$ と $\psi_{\text{refl.}}$ に変換するこれらの規則は接続公式として知られる．

6.8　WKB 近似

前節の結果は特別なポテンシャル $V(x) = -Fx$ よりもさらに一般的な場合にも成り立つとすでに述べたが，これが正しいことを示すためにシュレーディンガー方程式

$$\left(E+\frac{\hbar^2}{2M}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}-V(x)\right)\psi_E(x)=0 \tag{6.8.1}$$

を考える．この方程式を変形して，

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}+\frac{1}{\hbar^2}\big[p(x)\big]^2\right)\psi_E(x)=0\,,\qquad \big[p(x)\big]^2=2M\big(E-V(x)\big) \tag{6.8.2}$$

とする．ここで $\pm p(x)$ は x での古典的運動量である．これまでの経験を考慮して，

$$\psi_E(x)=A(x)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi(x)} \tag{6.8.3}$$

の形をした解を求めてみることにしよう．ここで $A(x)$ は実数の振幅で，$\phi(x)$ は実数の位相である．煩雑さを避けるために x に関する微分をダッシュで表示すると，$\psi_E(x)$ の 1 階および 2 階微分は

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_E(x)&\equiv\psi_E'=A'\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}+A\mathrm{i}\phi'\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\,,\\ \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\psi_E(x)&\equiv\psi_E''=A''\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}+2A'\mathrm{i}\phi'\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}+A\mathrm{i}\phi''\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}-A\phi'^2\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\end{aligned} \tag{6.8.4}$$

であるから，シュレーディンガー方程式に代入することで 2 個の微分方程式

$$A''-A\phi'^2+\frac{1}{\hbar^2}p^2A=0\,,\qquad 2A'\phi'+A\phi''=0 \tag{6.8.5}$$

を得る．2 番目の方程式に A を掛けてまとめると

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(A^2\phi'\right)=0\qquad \text{したがって}\quad A=\frac{C}{\sqrt{\phi'}} \tag{6.8.6}$$

となり，C は積分定数である．明らかに「定数」は「x に依存しない」ことを意味するが，E に依存してもよいし，実は依存する．2 番目の方程式

$$\frac{A'}{A}=-\frac{1}{2}\frac{\phi''}{\phi'} \tag{6.8.7}$$

をさらに微分すると

$$\frac{A''}{A}=\left(\frac{A'}{A}\right)'+\left(\frac{A'}{A}\right)^2=-\frac{1}{2}\left(\frac{\phi''}{\phi'}\right)'+\frac{1}{4}\left(\frac{\phi''}{\phi'}\right)^2 \tag{6.8.8}$$

となり，これを 1 番目の式に代入すれば位相の微分方程式

$$\phi'^2=\frac{1}{\hbar^2}p^2-\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\frac{\phi''}{\phi'}+\frac{1}{4}\left(\frac{\phi''}{\phi'}\right)^2 \tag{6.8.9}$$

を得る．この方程式は近似を求める手段としてのみ有用である．まず初めに $(p^2>0)$

<u>0 次</u>：　$$\phi'=\pm\frac{1}{\hbar}p \tag{6.8.10}$$

となり，次に進むと

$$\underline{1\text{次}}: \qquad \phi' = \pm\sqrt{\left(\frac{1}{\hbar}p\right)^2 - \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\left(\frac{p'}{p}\right) + \frac{1}{4}\left(\frac{p'}{p}\right)^2}$$

$$\cong \pm\left[\frac{1}{\hbar}p - \frac{1}{4}\frac{\hbar}{p}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\frac{p'}{p} + \frac{1}{8}\frac{\hbar}{p}\left(\frac{p'}{p}\right)^2\right] \tag{6.8.11}$$

を得る．ここで局所的(換算）ド・ブロイ波長と呼ばれる量

$$\lambda(x) = \frac{\hbar}{p(x)} \tag{6.8.12}$$

を用いると，

$$\underline{1\text{次}}: \qquad \phi' \cong \pm\frac{1}{\hbar}\left[p - \frac{1}{4}\left(\lambda\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^2 p + \frac{1}{8p}\left(\lambda\frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}x}\right)^2\right] \tag{6.8.13}$$

と表される．これより運動量が距離 λ の間にほんの少ししか変化しない場合は，主要項(6.8.10)がよい近似であることがわかる．そのための条件は

$$\left|\lambda(x)\frac{\mathrm{d}p(x)}{\mathrm{d}x}\right| \ll p(x) \tag{6.8.14}$$

と表され，さらに書き換えると

$$\left|\lambda\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}V\right| \ll |E-V| \tag{6.8.15}$$

となり，さらに書き換えて

$$\frac{\hbar^2}{2M}\frac{(\mathrm{d}V/\mathrm{d}x)^2}{|E-V|^3} \ll 1 \tag{6.8.16}$$

となる．

この条件は $E-V=0$ となる $x=x_0$ の近傍では破れてしまうことは明らかである．小さな $x-x_0$ において

$$E - V(x) \cong F(x-x_0) \quad \text{ただし} \ F = -\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}(x_0) \tag{6.8.17}$$

と展開できる状況のもとで，条件(6.8.16)は

$$|x-x_0| \gg \left(\frac{\hbar^2}{MF}\right)^{\frac{1}{3}} \tag{6.8.18}$$

となる（ここで $F>0$ を仮定している）．もちろんポテンシャルの展開において高次の項が小さいためには

$$|x-x_0|\left|\frac{\mathrm{d}^2V}{\mathrm{d}x^2}\right| \ll F \tag{6.8.19}$$

が必要となり，近似の成り立つ条件(6.8.18)と組み合わせると

$$\left|\frac{\mathrm{d}^2V}{\mathrm{d}x^2}(x_0)\right| \ll F\left(\frac{MF}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}} \tag{6.8.20}$$

が成り立つことが要求される．

この状況下で，$\left[p(x)\right]^2 > 0$ を満たす古典的に許される領域内での波動関数は

$$\psi \propto \frac{1}{\sqrt{p}} \mathrm{e}^{\pm \frac{\mathrm{i}}{\hbar} \int^x \mathrm{d}x' \, p(x')} \tag{6.8.21}$$

であり，以前に議論した $\psi_{\mathrm{inc.}}, \psi_{\mathrm{refl.}}, \psi_{\mathrm{trans.}}$ の間の簡単な接続公式が適用できる．このようにして特別な例 $V(x) = -Fx$ で見出された結果を（全体の規格化定数を除いて）再び得ることができた．

量子論の文献では，この近似方法はイニシャルを並べた WKB 近似として認知されているが，それは 1926 年のウェンツェル*，クラマース†，およびブリュアン‡の仕事によるものとされているからである．しかしこの近似はすでに 1924 年にジェフリーズ§によって明確に与えられ，さらにグリーン¶やカルリーニ‖（それぞれ 1837 と 1817 の仕事）にまで遡る長い歴史を持っている．

漸近形は $E - V = 0$ となる位置 x_0 から十分に離れた左右の領域でのみ有効である．古典的に許される領域（$x > x_0$, $p(x)$ は正）と，禁止される領域（$x < x_0$, $p(x)$ は虚数）の間の遷移領域も含む統一された近似を持つことができれば素晴らしいだろう．この目的のためにシュレーディンガー方程式 (6.8.2) に戻り，新しい変数 σ を

$$\frac{1}{\hbar} \int_{x_0}^{x} \mathrm{d}x' \, p(x') = \frac{2}{3}(-\sigma)^{\frac{3}{2}} \qquad \text{ここで} \quad \begin{cases} \sigma(x) < 0 & (\, x > x_0 \,)\,, \\ \sigma(x) > 0 & (\, x < x_0 \,) \end{cases} \tag{6.8.22}$$

で定義すると，微分は

$$\frac{1}{\hbar} \mathrm{d}x \, p = -\sqrt{-\sigma} \, \mathrm{d}\sigma \tag{6.8.23}$$

となる．ここでスケールされた運動量 $\chi(x)$ を

$$\chi \equiv p/\sqrt{-\sigma}\,, \qquad p^2 = -\sigma \chi^2 \tag{6.8.24}$$

によって導入すると

$$-\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} = \chi \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma} \tag{6.8.25}$$

となるから，シュレーディンガー方程式は

$$\left(\chi \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma} \chi \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma} - \sigma \chi^2 \right) \psi = 0 \qquad \text{または} \qquad \left(\frac{1}{\chi} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma} \chi \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma} - \sigma \right) \psi = 0 \tag{6.8.26}$$

となる．そこで波動関数を

$$\psi = \chi^{-\frac{1}{2}} \overline{\psi} \tag{6.8.27}$$

---

*Gregor WENTZEL (1898–1978) †Hendrik Anthony KRAMERS (1894–1952) ‡Léon BRILLOUIN (1889–1969) §Sir Harold JEFFREYS (1891–1989) ¶George GREEN (1793–1841) ‖Francesco CARLINI (1783–1862)

と表し，以下の微分演算の恒等式(ダッシュは σ に関する微分を示す)

$$\chi^{\mp\frac{1}{2}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma}\chi^{\pm\frac{1}{2}}=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma}\pm\frac{1}{2}\frac{\chi'}{\chi}\,,$$

$$\begin{aligned}\frac{1}{\chi}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma}\chi\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma}&=\chi^{-\frac{1}{2}}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma}+\frac{1}{2}\frac{\chi'}{\chi}\right)\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma}-\frac{1}{2}\frac{\chi'}{\chi}\right)\chi^{\frac{1}{2}}\\&=\chi^{-\frac{1}{2}}\left[\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma}\right)^2-\frac{1}{2}\left(\frac{\chi'}{\chi}\right)'-\frac{1}{4}\left(\frac{\chi'}{\chi}\right)^2\right]\chi^{\frac{1}{2}}\end{aligned}\tag{6.8.28}$$

を用いると，シュレーディンガー方程式から次の方程式

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\sigma^2}-\sigma-\frac{1}{2}\left(\frac{\chi'}{\chi}\right)'-\frac{1}{4}\left(\frac{\chi'}{\chi}\right)^2\right]\overline{\psi}=0\tag{6.8.29}$$

を得る．

以前と同様に，漸近領域においては $(\chi'/\chi)'$ および $(\chi'/\chi)^2$ は(σ と比べて)相対的に小さいであろう．今回はしかし，x_0 の近くを考えているから

$$\begin{aligned}p(x)&\cong\begin{cases}\sqrt{2MF(x-x_0)} & (x\lesssim x_0)\,,\\ \mathrm{i}\sqrt{2MF(x_0-x)} & (x\gtrsim x_0)\,,\end{cases}\\ \sigma(x)&\cong\left(2MF/\hbar^2\right)^{\frac{1}{3}}(x_0-x)\,,\\ \chi(x)&\cong\left(2\hbar MF\right)^{\frac{1}{3}}\end{aligned}\tag{6.8.30}$$

などが成り立ち，スケールされた運動量 χ は一定となり，したがって式(6.8.29)での付加項は無視できる．このようにして至る所で成り立つ近似方程式

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\sigma^2}-\sigma\right)\overline{\psi}=0\tag{6.8.31}$$

を得た．この方程式の解は

$$\overline{\psi}\propto\mathrm{Ai}(\sigma)\,,\qquad\psi\propto\frac{(-\sigma)^{\frac{1}{4}}}{p^{\frac{1}{2}}}\mathrm{Ai}(\sigma)\tag{6.8.32}$$

である．便宜上，比例係数を $2\sqrt{\pi}$ とし，エアリー関数の $|\sigma|\gg 1$ での表式(式(6.7.5)および(6.7.11))を用いると，波動関数の $-\sigma\gg 1$ での漸近形は期待通り

$$\psi\cong\frac{2}{\sqrt{p}}\cos\left(\frac{2}{3}(-\sigma)^{\frac{3}{2}}-\frac{\pi}{4}\right)=\frac{2}{\sqrt{p(x)}}\cos\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x_0}^{x}\mathrm{d}x'\,p(x')-\frac{\pi}{4}\right)\tag{6.8.33}$$

であり，同様に $\sigma\gg 1$ では

$$\psi\cong\frac{1}{\sqrt{|p|}}\mathrm{e}^{-\frac{2}{3}\sigma^{\frac{3}{2}}}=\frac{1}{\sqrt{|p(x)|}}\mathrm{e}^{\frac{1}{\hbar}\int_{x_0}^{x}\mathrm{d}x'\,|p(x')|}\tag{6.8.34}$$

となる．

しかしこの漸近形を用いると，たとえば $x = x_0$ の ψ の値は発散する振幅因子 $1/\sqrt{|p(x)|}$ のために無限大となってしまうが，先ほど求めた近似解では有限の値を与える．この値を求めるには，$x \to x_0$ のもとで $\sigma \to 0$ および $p \to 0$ となること，さらに $(-\sigma)^{\frac{1}{4}}/p^{\frac{1}{2}} = \chi^{-\frac{1}{2}}$ の極限の値を必要とする．この結果は式(6.8.30)で与えられている．そこで式(6.8.32)の比例係数を再び $2\sqrt{\pi}$ とすると

$$\psi(x_0) = 2\sqrt{\pi/\chi(x_0)}\,\mathrm{Ai}(0) = \frac{1.2585}{(2\hbar MF)^{\frac{1}{6}}} \tag{6.8.35}$$

を得る．

ところで，漸近形にかかっている因子 $1/\sqrt{p(x)}$ の物理的な意味に注意することを忘れてはならない．入射波の漸近形は

$$\psi_{\mathrm{inc.}} \propto \frac{1}{\sqrt{p(x)}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left(\frac{1}{\hbar}\int_{x_0}^{x}\mathrm{d}x'\,p(x') - \frac{\pi}{4}\right)} \tag{6.8.36}$$

であるから，

$$|\psi_{\mathrm{inc.}}|^2 \propto \frac{1}{p(x)} \tag{6.8.37}$$

となり，x の周りの間隔 $\mathrm{d}x$ の間に入射粒子を見出す(相対)確率は

$$\mathrm{d}x|\psi_{\mathrm{inc.}}|^2 \propto \frac{\mathrm{d}x}{M\frac{\mathrm{d}x}{\mathrm{d}t}} \propto \mathrm{d}t \tag{6.8.38}$$

と表される．これは，ある与えられた範囲に粒子を見出す確率は，この範囲を粒子が過ごす時間に比例するという非常に合理的な結果である．ただし，ここでは入射波のみを考慮したことに注意しよう．反射波のみを考えた場合も同じ結果が得られる．しかし実際には両方が存在するので，

$$\mathrm{d}x|\psi|^2 \propto \frac{\mathrm{d}x}{p(x)}\,4\cos^2\left(\frac{1}{\hbar}\int\mathrm{d}x\,p - \frac{\pi}{4}\right) \tag{6.8.39}$$

となり，粒子的因子 $[p(x)]^{-1}\mathrm{d}x \propto \mathrm{d}t$ と，入射波と反射波の間の干渉を記述する波動的因子の積で表されている．実際，ある位置では単位長さ当たりの確率はゼロであり，またある位置では入射波だけの場合に比べて 4 倍となる．**平均的**には $|\psi_{\mathrm{inc.}}|^2$ の 2 倍であり，$|\psi_{\mathrm{inc.}}|^2$ と $|\psi_{\mathrm{refl.}}|^2$ の寄与の和を表している．

6.9 エアリー関数のゼロ点と極値点

波動関数がエアリー関数 $\mathrm{Ai}(\sigma)$ で作られるから，この関数の詳細な性質に注意を向けることにする．そこで特に $\mathrm{Ai}(\sigma)$ のゼロ点すなわち

$$\mathrm{Ai}(\overline{\sigma}_n) = 0\,, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{6.9.1}$$

を満たす点，および最大値または最小値などの極値を与える点(極値点)すなわち

$$\mathrm{Ai}'\big(\overline{\overline{\sigma}}_n\big) = 0\,, \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{6.9.2}$$

を満たす点を調べることにしよう．エアリー関数の変数 σ に関する微分は今後ともダッシュで示すことにする．

ゼロ点 $\overline{\sigma}$ と極値点 $\overline{\overline{\sigma}}$ を決定するために，今度は実数の振幅・位相表示を用いて微分すると

$$\begin{aligned}\mathrm{Ai}(\sigma) &= A\cos\phi\,,\\ \mathrm{Ai}' &= A'\cos\phi - A\phi'\sin\phi\,,\\ \mathrm{Ai}'' &= A''\cos\phi - 2A'\phi'\sin\phi - A\phi'^2\cos\phi - A\phi''\sin\phi\end{aligned} \tag{6.9.3}$$

となる．式(6.4.14)の微分方程式 $\mathrm{Ai}'' = \sigma\,\mathrm{Ai}$ に代入し，$\cos\phi$ と $\sin\phi$ の係数がゼロに等しいとすることで，2つの微分方程式

$$A'' - A\phi'^2 = \sigma A\,, \qquad 2A'\phi' + A\phi'' = 0 \tag{6.9.4}$$

を得る．第2式を積分すると

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma}\big(A^2\phi'\big) = 0\,, \qquad A^2\phi' = -\frac{1}{\pi} \tag{6.9.5}$$

となる．ここで積分定数は漸近形(6.7.5)から導かれた．$\phi(\sigma)$ に対する近似は第1式

$$\phi'^2 = -\sigma + \frac{A''}{A} \tag{6.9.6}$$

から逐次的に求めることができる．最初の近似は WKB 近似であり，A''/A を無視する．したがって

<u>1次近似:</u>

$$\phi' = -\sqrt{-\sigma}\,, \quad \phi = \frac{2}{3}(-\sigma)^{\frac{3}{2}} - \frac{\pi}{4}\,, \qquad A = \frac{\pi^{-\frac{1}{2}}}{(-\sigma)^{\frac{1}{4}}} \tag{6.9.7}$$

である．ここで再び ϕ' の符号と WKB 領域 $(-\sigma \gg 1)$ での ϕ の振る舞いについて，式(6.7.5)から利用できる情報を用いた．この近似における $\mathrm{Ai}(\sigma)$ のゼロ点 $\overline{\sigma}$ は

$$\cos\big(\phi(\overline{\sigma})\big) \cong \cos\Big(\frac{2}{3}(-\overline{\sigma})^{\frac{3}{2}} - \frac{\pi}{4}\Big) = 0 \tag{6.9.8}$$

から決まり，

$$-\overline{\sigma}_n \cong \left[\frac{3\pi}{2}\left(n - \frac{1}{4}\right)\right]^{\frac{2}{3}} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{6.9.9}$$

で与えられる．厳密な値と比較すると

$$\begin{aligned}-\overline{\sigma}_1 &\cong 2.3203 = 2.3381 \times 0.9924\,,\\ -\overline{\sigma}_2 &\cong 4.0818 = 4.0879 \times 0.9985\,,\\ -\overline{\sigma}_3 &\cong 5.5172 = 5.5205 \times 0.9994\end{aligned} \tag{6.9.10}$$

となり，この最も簡単な近似が驚くほど正確であることを示している．

振幅 A がゆっくり変化するという近似では，$A\cos\phi$ の極値は $\phi(\overline{\overline{\sigma}}) = 0, \pi, 2\pi, \ldots$ で与えられるから，

$$-\overline{\overline{\sigma}}_n \cong \left[\frac{3\pi}{2}\left(n-\frac{3}{4}\right)\right]^{\frac{2}{3}} \qquad n = 1, 2, 3, \ldots \tag{6.9.11}$$

を得る．厳密な値と比較すると

$$\begin{aligned}
-\overline{\overline{\sigma}}_1 &\cong 1.1155 = 1.0188 \times 1.095\,, \\
-\overline{\overline{\sigma}}_2 &\cong 3.2616 = 3.2482 \times 1.0041\,, \\
-\overline{\overline{\sigma}}_3 &\cong 4.8263 = 4.8201 \times 1.0013
\end{aligned} \tag{6.9.12}$$

となり，$n=1$ 以外では非常によい一致を示していることがわかる．

位相 $\phi(\sigma)$ に対する近似を改良するために，A''/A に対して 1 次近似の式を代入すると

$$\left(\frac{A''}{A}\right)_{1^{\rm st}} = \frac{5}{16}\frac{1}{(-\sigma)^2} \tag{6.9.13}$$

となるから式(6.9.6)は

$$\phi'^2 = -\sigma\left[1+\frac{5}{16}\frac{1}{(-\sigma)^3}\right] \tag{6.9.14}$$

となり

$$\phi' = -\sqrt{-\sigma}\left[1+\frac{5}{32}\frac{1}{(-\sigma)^3}\right] \tag{6.9.15}$$

を得る．この方程式を解くと

<u>2 次近似:</u> $$\phi = \frac{2}{3}(-\sigma)^{\frac{3}{2}} - \frac{\pi}{4} - \frac{5}{48}(-\sigma)^{-\frac{3}{2}} \tag{6.9.16}$$

となる．ゼロ点の条件 $\phi(\overline{\sigma}) = \pi/2, 3\pi/2, 5\pi/2, \ldots$ より，式(6.9.9)を改良した値

$$-\overline{\sigma}_n \cong \left[\frac{3\pi}{2}\left(n-\frac{1}{4}\right)\right]^{\frac{2}{3}} + \frac{5}{48}\left[\frac{3\pi}{2}\left(n-\frac{1}{4}\right)\right]^{-\frac{4}{3}} \tag{6.9.17}$$

を得る．$\mathrm{Ai}(\sigma)$ のゼロ点の厳密な値と比較すると

$$\begin{aligned}
-\overline{\sigma}_1 &\cong 2.320\,251 + 0.019\,349 = 2.339\,600 = 2.338\,107 \times 1.000\,638\,, \\
-\overline{\sigma}_2 &\cong 4.081\,810 + 0.006\,252 = 4.088\,062 = 4.087\,949 \times 1.000\,028\,, \\
-\overline{\sigma}_3 &\cong 5.517\,164 + 0.003\,422 = 5.520\,586 = 5.520\,560 \times 1.000\,005
\end{aligned} \tag{6.9.18}$$

とかなり改良されているが，これは驚くことではない．

エアリー関数の微分 Ai' のゼロ点に関しては，$(-\phi')^{-\frac{1}{2}}\cos\phi$ の極値点が

$$(-\phi')^{\frac{1}{2}}\left[\sin\phi + \frac{1}{2}\frac{\phi''}{(\phi')^2}\cos\phi\right] = 0 \tag{6.9.19}$$

によって決まることに注意する．ここで

$$\frac{1}{2}\frac{\phi''}{(\phi')^2} = -\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma}\frac{1}{\phi'} \cong \frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma}\frac{1}{\sqrt{-\sigma}} = \frac{1}{4}\frac{1}{(-\sigma)^{\frac{3}{2}}} \tag{6.9.20}$$

が小さいから，sin の中に取り込むと

$$\sin\left(\phi + \frac{1}{2}\frac{\phi''}{(\phi')^2}\right) = 0 \tag{6.9.21}$$

となる．この方程式の解

$$\phi + \frac{1}{2}\frac{\phi''}{(\phi')^2} = 0, \pi, 2\pi, \ldots \tag{6.9.22}$$

に $\phi(\sigma)$ の近似式(6.9.16)を代入して値を求めると

$$-\overline{\overline{\sigma}}_n \cong \left[\frac{3\pi}{2}\left(n - \frac{3}{4}\right)\right]^{\frac{2}{3}} - \frac{7}{48}\left[\frac{3\pi}{2}\left(n - \frac{3}{4}\right)\right]^{-\frac{4}{3}} \tag{6.9.23}$$

となる．Ai$'$ の厳密なゼロ点の値と比較すると

$$\begin{aligned}
-\overline{\overline{\sigma}}_1 &\cong 1.115\,460 - 0.117\,206 = 0.998\,255 = 1.018\,793 \times 0.9980\,, \\
-\overline{\overline{\sigma}}_2 &\cong 3.261\,626 - 0.013\,708 = 3.247\,917 = 3.248\,198 \times 0.999\,914\,, \\
-\overline{\overline{\sigma}}_3 &\cong 4.826\,316 - 0.006\,261 = 4.820\,055 = 4.820\,099 \times 0.999\,991
\end{aligned} \tag{6.9.24}$$

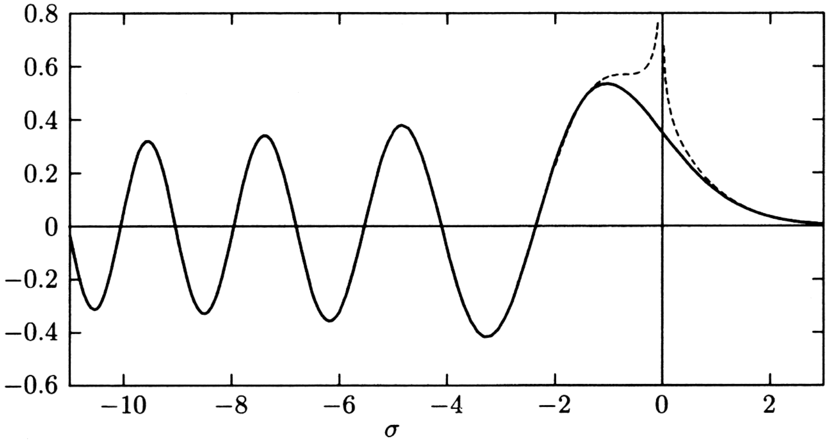
となり，$n = 1$ に対してよい一致を示し，$n > 1$ に対しては非常によい一致を示している．

エアリー関数のゼロ点 $\overline{\sigma}_1, \overline{\sigma}_2, \ldots$ を $\sigma_1, \sigma_3, \sigma_5, \ldots$ と記し，極値点 $\overline{\overline{\sigma}}_1, \overline{\overline{\sigma}}_2, \ldots$ を $\sigma_0, \sigma_2, \sigma_4, \ldots$ と記すと，2次近似(6.9.17)および(6.9.23)は

$$-\sigma_m \cong \left[\frac{3\pi}{4}\left(m + \frac{1}{2}\right)\right]^{\frac{2}{3}} - \left(\frac{1}{48} + \frac{1}{8}(-1)^m\right)\left[\frac{3\pi}{4}\left(m + \frac{1}{2}\right)\right]^{-\frac{4}{3}}\,,$$

$$m = 0, 1, 2, \ldots \qquad (m\text{ 奇数: ゼロ点; }m\text{ 偶数: 極値点}) \tag{6.9.25}$$

とまとめて表すことができる．エアリー関数 $\mathrm{Ai}(\sigma)$ を太線で図示すると

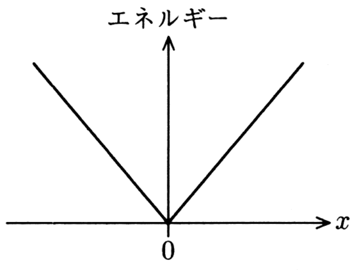


となり，関数 Ai(σ) は負の σ でゼロ点，極大点，極小点があり，$\sigma = 0$ で 0.3350 に等しく，$\sigma > 0$ で急速に減少する．破線は主要漸近形(6.7.5)および(6.7.11)を示している．

6.10 一定の復元力

線形ポテンシャル中のエネルギー固有値を求める問題に対して，今までの結果を直接応用できる．線形ポテンシャルを式と図で表すと

$$V(x) = F|x| \tag{6.10.1}$$



であり，一定の大きさの復元力

$$-\frac{\partial V}{\partial x} = -F\,\mathrm{sgn}(x) = \begin{cases} -F & (x > 0)\,, \\ +F & (x < 0) \end{cases} \tag{6.10.2}$$

を与える．エネルギー固有状態に関するシュレーディンガー方程式は

$$\left[E + \frac{\hbar^2}{2M}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - F|x|\right]\psi(x) = 0 \tag{6.10.3}$$

となる．この微分演算子は x について偶であり，$x \to -x$ の変換で方程式は

$$\left[E + \frac{\hbar^2}{2M}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} - F|x|\right]\psi(-x) = 0 \tag{6.10.4}$$

と不変である．もし $\psi(x)$ と $\psi(-x)$ 両方が解ならば，それらの和や差

$$\psi_{\text{even}}(x) = \frac{1}{2}\big[\psi(x) + \psi(-x)\big]\ , \qquad \psi_{\text{odd}}(x) = \frac{1}{2}\big[\psi(x) - \psi(-x)\big] \tag{6.10.5}$$

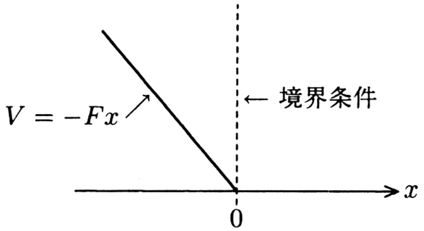
も解であり，これらは対称性

$$\psi_{\text{even}}(-x) = \psi_{\text{even}}(x)\ , \qquad \psi_{\text{odd}}(-x) = -\psi_{\text{odd}}(x) \tag{6.10.6}$$

で特徴付けられ，ψ および $\mathrm{d}\psi/\mathrm{d}x$ の連続性を認めるならば

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\psi_{\text{even}}(0) = 0\ , \qquad \psi_{\text{odd}}(0) = 0 \tag{6.10.7}$$

が成り立つ．この種の関数に対しては，領域 $x > 0$ または $x < 0$ を考えれば十分である．ここでは後者を採用し，これを以下に図示する．



この問題を解くことは以前に議論した状況に戻ることになる．ただしポテンシャルは $V = -Fx$ であり，さらに偶関数または奇関数について $x = 0$ で適切な境界条件が加わる．

解は

$$x < 0: \qquad \psi(x) \propto \mathrm{Ai}(\sigma) \quad \text{ただし} \quad -\sigma = \left(\frac{2MF}{\hbar^2}\right)^{\frac{1}{3}}\left(x + \frac{E}{F}\right) \tag{6.10.8}$$

である．したがって式(6.10.6)によれば，解は

$$\begin{aligned} \psi_{\text{even}}(x) &\propto \mathrm{Ai}\Big(\big(2MF/\hbar^2\big)^{\frac{1}{3}}\big(|x| - E/F\big)\Big)\ , \\ \psi_{\text{odd}}(x) &\propto \mathrm{sgn}(x)\,\mathrm{Ai}\Big(\big(2MF/\hbar^2\big)^{\frac{1}{3}}\big(|x| - E/F\big)\Big) \end{aligned} \tag{6.10.9}$$

で与えられ，境界条件(6.10.7)から

$$\begin{aligned} \left(\frac{2M}{\hbar^2F^2}\right)^{\frac{1}{3}} E &= \left\{ \begin{array}{ll} -\bar{\bar{\sigma}}_1\ ,\ -\bar{\bar{\sigma}}_2\ ,\ \ldots & \psi_{\text{even}} \\ -\bar{\sigma}_1\ ,\ -\bar{\sigma}_2\ ,\ \ldots & \psi_{\text{odd}} \end{array} \right\} \\ &= \left\{ \begin{array}{ll} -\sigma_0\ ,\ -\sigma_2\ ,\ \ldots & \psi_{\text{even}} \\ -\sigma_1\ ,\ -\sigma_3\ ,\ \ldots & \psi_{\text{odd}} \end{array} \right\} \end{aligned} \tag{6.10.10}$$

であることが要請される．これより線形ポテンシャル(6.10.1)のエネルギー固有値は

$$E_m = (-\sigma_m)\left(\frac{\hbar^2 F^2}{2M}\right)^{\frac{1}{3}} \qquad (m = 0, 1, 2, \ldots) \tag{6.10.11}$$

で与えられる．式(6.9.25)で与えられた $-\sigma_m$ の2次近似を用いると，エネルギーは

$$\begin{aligned}\left(\frac{2M}{\hbar^2 F^2}\right)^{\frac{1}{3}} E_m \cong& \left[\frac{3\pi}{4}\left(m + \frac{1}{2}\right)\right]^{\frac{2}{3}} \\ &- \frac{1}{8}\left((-1)^m + \frac{1}{6}\right)\left[\frac{3\pi}{4}\left(m + \frac{1}{2}\right)\right]^{-\frac{4}{3}}\end{aligned} \tag{6.10.12}$$

と表される．

偶関数の波動関数を $\psi_0, \psi_2, \psi_4, \ldots$ ，そして奇関数の波動関数を $\psi_1, \psi_3, \psi_5, \ldots$ と記すと，$x > 0$ での波動関数は

$$x > 0: \qquad \psi_m(x) = c_m \big(2MF/\hbar^2\big)^{\frac{1}{6}} \operatorname{Ai}\Big(\sigma_m + \big(2MF/\hbar^2\big)^{\frac{1}{3}} x\Big) \tag{6.10.13}$$

と表される．(正の)定数 c_m を規格化条件

$$\begin{aligned}1 = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, |\psi_m(x)|^2 &= 2\int_0^{\infty} \mathrm{d}x\, |\psi_m(x)|^2 \\ &= 2c_m^2 \int_{\sigma_m}^{\infty} \mathrm{d}\sigma \big[\operatorname{Ai}(\sigma)\big]^2\end{aligned} \tag{6.10.14}$$

から決定すると

$$c_m = \left(2\int_{\sigma_m}^{\infty} \mathrm{d}\sigma \big[\operatorname{Ai}(\sigma)\big]^2\right)^{-\frac{1}{2}} \tag{6.10.15}$$

となる．ここで m が奇数ならば $\operatorname{Ai}(\sigma_m) = 0$ であり，m が偶数ならば $\operatorname{Ai}'(\sigma_m) = 0$ であることを思い起こそう．$\operatorname{Ai}(\sigma)$ がしたがう微分方程式(6.4.14)

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\sigma^2} \operatorname{Ai}(\sigma) = \sigma \operatorname{Ai}(\sigma) \tag{6.10.16}$$

をさらに微分すると

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\sigma^2} \operatorname{Ai}'(\sigma) = \sigma \operatorname{Ai}'(\sigma) + \operatorname{Ai}(\sigma) \tag{6.10.17}$$

となる．したがってエアリー関数の2乗は

$$\begin{aligned}\big[\operatorname{Ai}(\sigma)\big]^2 &= \operatorname{Ai}(\sigma)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\sigma^2} \operatorname{Ai}'(\sigma) - \operatorname{Ai}'(\sigma)\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\sigma^2} \operatorname{Ai}(\sigma) \\ &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma}\Big(\operatorname{Ai}(\sigma)\operatorname{Ai}''(\sigma) - \big[\operatorname{Ai}'(\sigma)\big]^2\Big) \\ &= -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\sigma}\Big(\big[\operatorname{Ai}'(\sigma)\big]^2 - \sigma\big[\operatorname{Ai}(\sigma)\big]^2\Big)\end{aligned} \tag{6.10.18}$$

と全微分で表すことができるから

$$\frac{1}{2c_m^2} = \int_{\sigma_m}^{\infty} \mathrm{d}\sigma \left[\mathrm{Ai}(\sigma)\right]^2 = \left(\left[\mathrm{Ai}'(\sigma_m)\right]^2 - \sigma_m\left[\mathrm{Ai}(\sigma_m)\right]^2\right)$$

$$= \begin{cases} (-\sigma_m)\left[\mathrm{Ai}(\sigma_m)\right]^2 & (m:\text{偶数}) \\ \left[\mathrm{Ai}'(\sigma_m)\right]^2 & (m:\text{奇数}) \end{cases} \tag{6.10.19}$$

を得る．

ここで主要(WKB)近似が規格化定数 c_m をどれだけよく表しているか調べてみよう．まず

$$\mathrm{Ai}(\sigma) \cong \pi^{-\frac{1}{2}}(-\sigma)^{-\frac{1}{4}}\cos\left(\frac{2}{3}(-\sigma)^{-\frac{3}{2}} - \frac{\pi}{4}\right),$$
$$\mathrm{Ai}'(\sigma) \cong \pi^{-\frac{1}{2}}(-\sigma)^{\frac{1}{4}}\sin\left(\frac{2}{3}(-\sigma)^{-\frac{3}{2}} - \frac{\pi}{4}\right) \tag{6.10.20}$$

から，

$$\left[\mathrm{Ai}'(\sigma)\right]^2 - \sigma\left[\mathrm{Ai}(\sigma)\right]^2 \cong \frac{1}{\pi}\sqrt{-\sigma} \tag{6.10.21}$$

を得る．そして式(6.9.25)を用いると

$$c_m \cong \left(\frac{\pi}{2}\right)^{\frac{1}{2}}\left[\frac{3\pi}{4}\left(m+\frac{1}{2}\right)\right]^{-\frac{1}{6}} = \pi^{\frac{1}{3}}(6m+3)^{-\frac{1}{6}} \tag{6.10.22}$$

と表すことができる．厳密な値と比較すると

$$\begin{aligned} c_0 &\cong 1.21954 = 1.30784 \times 0.9325, & c_1 &\cong 1.01549 = 1.00841 \times 1.0070, \\ c_2 &\cong 0.93261 = 0.93634 \times 0.9960, & c_3 &\cong 0.88175 = 0.88046 \times 1.0015, \\ c_4 &\cong 0.84558 = 0.84666 \times 0.9987, & c_5 &\cong 0.81777 = 0.81727 \times 1.0006 \end{aligned} \tag{6.10.23}$$

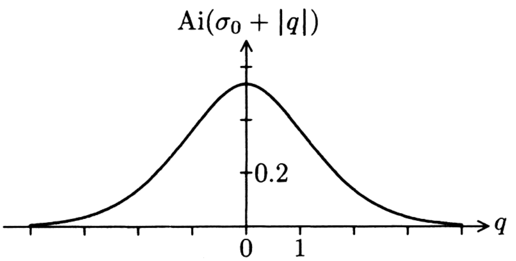
となり，誤差は $m=0$ 以外では 1% よりかなり小さい．

6.11 レーリー・リッツの変分法

WKB 近似であまり成功しない1つの状態は，最低エネルギー状態 $m=0$ で振動しない波動関数であることはそれほど驚くことではない．下図を見よ．

$\psi_0(x) \propto \mathrm{Ai}(\sigma_0 + |q|)$

ただし $q = (2MF/\hbar^2)^{\frac{1}{3}}x$.



(6.11.1)

この状態に特に適した方法がある．スペクトルが下限を持ち

$$H' = E \geq E_0 \tag{6.11.2}$$

となる任意のハミルトニアンを考えよう．ここで考えている例 $H = p^2/(2M) + F|x|$ では明らかに $H' > 0$ であり，最低のエネルギー状態が存在する．一般に

$$(H - E_0)' = E - E_0 \geq 0 \tag{6.11.3}$$

であるから，任意の状態 $|\ \rangle$ に対して $H - E_0$ の期待値は正であり

$$\langle (H - E_0) \rangle = \sum_E \underbrace{(E - E_0)}_{\geq 0} p(E) \geq 0 \tag{6.11.4}$$

となる．ここで等号は $|\ \rangle = |H' = E_0\rangle$ の場合のみ成立する．等価な表現は

$$\langle H \rangle \geq E_0 \tag{6.11.5}$$

であるから，任意の状態 $|\ \rangle$ に対して期待値 $\langle H \rangle$ は E_0 の上限を与える．そこで $\langle H \rangle$ を最小化してよい近似値を得るように試みることになる．量子論の文献では，これはレーリー[*]・リッツ[†]の変分法として知られている．

規格化された(実)波動関数を $\psi(x)/\sqrt{\int \mathrm{d}x' \left[\psi(x')\right]^2}$ と書くと便利なことがしばしばある．ここでもそれを用いると

$$\left\langle \frac{1}{2M} p^2 + F|x| \right\rangle = \frac{\displaystyle\int \mathrm{d}x \left[\frac{1}{2M} \left(-\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial}{\partial x} \psi \right) \left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}} \frac{\partial}{\partial x} \psi \right) + \psi F|x| \psi \right]}{\displaystyle\int \mathrm{d}x\, \psi^2} \geq E_0 \tag{6.11.6}$$

となる．いま

$$x = \left(\frac{\hbar^2}{2MF} \right)^{\frac{1}{3}} q \qquad \text{および} \qquad E_0 = \left(\frac{\hbar^2 F^2}{2M} \right)^{\frac{1}{3}} \mathcal{E}_0 \tag{6.11.7}$$

と書くと，不等式は

$$\frac{\displaystyle\int \mathrm{d}q \left[\left(\frac{\mathrm{d}\psi}{\mathrm{d}q} \right)^2 + |q| \psi^2 \right]}{\displaystyle\int \mathrm{d}q\, \psi^2} \geq \mathcal{E}_0 \tag{6.11.8}$$

と表される．ここで q の範囲はたとえば $0 \to \infty$ であり，さらに $(\mathrm{d}\psi/\mathrm{d}q)(0) = 0$ を満たすとする．

次に適切な試行波動関数 $\psi(q)$ を選び出さなければならない．それは $q = 0$ で最大

---

*John William STRUTT, Lord Rayleigh (1842–1919) †Walther RITZ (1878–1909)

であり，大きな q で急速に減少しなければならない．試行波動関数として（形状に対するある程度の予備知識を持って）

$$\psi(q) = \mathrm{e}^{-\frac{2}{3}\lambda q^{\frac{3}{2}}} \tag{6.11.9}$$

を採用し，λ は調整できるパラメーターであるとしよう．すると不等式は

$$\frac{\int_0^\infty \mathrm{d}q\ (\lambda^2 q + q)\ \mathrm{e}^{-\frac{4}{3}\lambda q^{\frac{3}{2}}}}{\int_0^\infty \mathrm{d}q\ \mathrm{e}^{-\frac{4}{3}\lambda q^{\frac{3}{2}}}} \geq \mathcal{E}_0 \tag{6.11.10}$$

となり，

$$q = \left(\frac{3}{4\lambda}\right)^{\frac{2}{3}} s^{\frac{2}{3}} \tag{6.11.11}$$

とおくと，

$$(\lambda^2+1)\left(\frac{3}{4\lambda}\right)^{\frac{2}{3}} \frac{\int_0^\infty \mathrm{d}s\, s^{\frac{1}{3}}\,\mathrm{e}^{-s}}{\int_0^\infty \mathrm{d}s\, s^{-\frac{1}{3}}\,\mathrm{e}^{-s}} = \left(\frac{3}{4}\right)^{\frac{2}{3}} \frac{(\frac{1}{3})!}{(-\frac{1}{3})!}\left(\lambda^{\frac{4}{3}} + \lambda^{-\frac{2}{3}}\right) \geq \mathcal{E}_0 \tag{6.11.12}$$

となる．ここで $(\frac{1}{3})! = 0.892\,980$, $(-\frac{1}{3})! = 1.354\,118$, $(\frac{1}{3})!\,(-\frac{1}{3})! = \frac{1}{3}\pi/\sin(\frac{1}{3}\pi) = 2\pi/3^{\frac{3}{2}}$ は階乗関数（ガンマ関数）の性質を示している．期待値を最小化する λ は

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda}\left(\lambda^{\frac{4}{3}} + \lambda^{-\frac{2}{3}}\right) = \frac{4}{3}\lambda^{\frac{1}{3}} - \frac{2}{3}\lambda^{-\frac{5}{3}} = 0 \tag{6.11.13}$$

より求まり，

$$\lambda^2 = \frac{1}{2}\,, \qquad \lambda^{\frac{4}{3}} + \lambda^{-\frac{2}{3}} = \frac{3}{2^{\frac{2}{3}}} \tag{6.11.14}$$

を満たす．それゆえ

$$\mathcal{E}_0 \leq \frac{3^{\frac{5}{3}}}{4}\frac{(\frac{1}{3})!}{(-\frac{1}{3})!} = 1.0288 \quad \Big[= 1.0188 \times 1.0098\Big] \tag{6.11.15}$$

となる．この近似値は厳密な値より確かに大きく，試行関数の簡単さを考えると驚くほどよい値である．もっと一般的な試行関数であればさらによい結果を与えるだろう．

問題

6-1a　1自由度のハミルトニアン $H = p^2/(2M) + V(x)$ で $V(x)$ は任意とする．粒子を x' と $x' + \mathrm{d}x'$ の間に見出す確率は，確率密度

$$\rho(x', t) = \Big\langle \delta\big(x(t) - x'\big) \Big\rangle$$

を使うと $\mathrm{d}x'\,\rho(x', t)$ となる．この ρ は連続の方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(x', t) + \frac{\partial}{\partial x'} j(x', t) = 0$$

を満たすことを示せ．ただし確率の流れ密度は

$$j(x',t) = \frac{1}{M}\left\langle p(t)\,.\,\delta\big(x(t)-x'\big)\right\rangle$$

で与えられるとする．これを 3 次元の運動に一般化せよ．

6-1b　運動量 p についての確率密度

$$\rho(p',t) = \left\langle \delta\big(p(t)-p'\big)\right\rangle$$

について考える．連続の方程式

$$\frac{\partial}{\partial t}\rho(p',t) + \frac{\partial}{\partial p'}j(p',t) = 0$$

を満たす確率の流れ密度を求めよ．3 次元に拡張するとどうなるか．

6-2a　1 自由度で一定の力 F が働く系のハミルトニアン $H = p^2/(2M) - Fx$ について：運動方程式を立て，それを解け．問題 5-7a と同様に，時間 $t=0$ で最小不確定性の状態 $|\delta\rangle$ にあったとして，$[\delta x(t)]^2$ および $[\delta p(t)]^2$ を求めよ．

6-2b　任意の初期状態にあったとして，問題 5-8a と同様の問いに答えよ．なぜ T および t_0 が F に依存しないことが予想できるのか？ もし力が時間に依存する $F(t)$ の場合，どのような変更があるか？

6-3a　1 自由度で角振動数 ω が一定のハミルトニアン $H = p^2/(2M) + \frac{1}{2}M\omega^2x^2$ について：問題 6-2a と同様の問いに答えよ．さらに解を用いて $x(t)$ と $p(t)$ が，要求される交換関係を満たすことを示せ．そして $\delta x(t)\,\delta p(t) \geq \frac{1}{2}\hbar$ も示せ．どのようなときにすべての時間 t において等号が成立するのか？

6-3b　ここで初期状態で不確定性が最小であるという条件を取り除く．問題 5-8a で用いた方法で $\delta x(t)$ および $\delta p(t)$ の表式を求めよ．

6-4　3 次元のハミルトニアン $H = \boldsymbol{p}^2/(2M)$ について：$\boldsymbol{N} = \boldsymbol{p}(t)t - M\boldsymbol{r}(t)$ および一定の速度 $\boldsymbol{v}$ に対して次の式を計算し，結果を解釈せよ．

$$\left\langle \boldsymbol{r}',t\right| \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{N}}\left|\boldsymbol{p}'\right\rangle .$$

6-5a　1 自由度の問題：関係式

$$\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}f(p)}\,x\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}f(p)} = x - \frac{\mathrm{d}f(p)}{\mathrm{d}p}$$

を証明し(ヒント：問題 1-55 を思い出せ)，次の例に対して適用してみよ．

$$\frac{p^2}{2M} - Fx = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^3}{6MF}}(-Fx)\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^3}{6MF}} \ .$$

6-5b　上記の結果を使って次の式を示せ．

$$\begin{aligned}
\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left(\frac{p^2}{2M} - Fx\right)t} &= \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^3}{6MF}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Fxt}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^3}{6MF}} \\
&= \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Fxt}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^2}{2M}t}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p}{M}\frac{1}{2}Ft^2}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{F^2t^3}{6M}} \\
&= \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{F^2t^3}{6M}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p}{M}\frac{1}{2}Ft^2}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^2}{2M}t}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Fxt} \ .
\end{aligned}$$

これらは問題 2-11 の一例となっている．

6-6a　$H = p^2/(2M) - Fx$ に対して，問題 6-5b の最初の表式を用いて

$$\langle p', t|p''\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p'^3}{6MF}}\,\delta(p' - p'' - Ft)\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p''^3}{6MF}}$$

が成り立つことを示せ．$F \to 0$ の極限でこれはどうなるか？

6-6b　上記の $\langle p', t|p''\rangle$ がしたがう p 表示のシュレーディンガー方程式と初期条件を求めよ．

6-7　$H = p^2/(2M) - Fx$ に対して，問題 6-5b の 2 番目の表式を用いて

$$\langle x', t|p'\rangle = \frac{1}{\sqrt{2\pi\hbar}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}x'(p' + Ft)}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p'^2}{2M}t}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p'}{M}\frac{1}{2}Ft^2}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{F^2t^3}{6M}}$$

を導け．そして量子作用原理を使ってこの結果を別の方法で導け．

6-8　問題 6-5b の 3 番目の結果を適用して $\langle p', t|x'\rangle$ を求めよ．この結果は $\langle x', t|p'\rangle$ において，$t \to -t$ として，複素共役をとれば得られることを確かめよ．なぜそうなるのか？

6-9　1 自由度のハミルトニアン $H = p^2/(2M)$ に対して，量子作用原理を適用して次の式を計算せよ．

$$\frac{\partial}{\partial M}\langle p', t|p''\rangle\,, \quad \frac{\partial}{\partial M}\langle x', t|p'\rangle\,, \quad \frac{\partial}{\partial M}\langle x', t|x''\rangle\,.$$

これらの結果はそれぞれの時間変換関数のすでに知っている形からみて正しいか？

6-10　ハミルトニアンを $H = p^2/(2M) - Fx$ として，問題 6-9 と同様に，次の式を計算せよ．

$$\frac{\partial}{\partial F}\langle x', t|p'\rangle = ?\,, \quad \frac{\partial}{\partial F}\langle x', t|x''\rangle = ?\,.$$

6-11　1自由度のハミルトニアンを

$$H = \frac{1}{2M}\left[p - \frac{\partial\lambda(x,t)}{\partial x}\right]^2 - \frac{\partial\lambda(x,t)}{\partial t}$$

とする．力 $M(\mathrm{d}/\mathrm{d}t)^2 x$ は「ゲージ」$\lambda(x,t)$ に依存するか？ 量子作用原理を使って時間変換関数 $\langle x', t_1 | x'', t_2 \rangle$ の λ 依存性を見出せ．

6-12　式(6.1.31)における明らかな平方根の任意性について：6.3節の議論にしたがい

$$\sqrt{\frac{1}{2\mathrm{i}\sin(\omega t)}} = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2}\omega t}\left(1 - \mathrm{e}^{-\epsilon}\,\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\omega t}\right)^{-\frac{1}{2}}\Bigg|_{\epsilon > 0,\ \epsilon \to 0}$$

と書くことにする．$\epsilon > 0$ に対して，右辺は ωt の連続関数であることを示せ．$\epsilon \to 0$ の極限をとると，$k\pi < \omega t < (k+1)\pi$ (k=整数)に対してどのようになるか？

6-13a　時間に依存する力 $F(t)$ が時間 $t=0$ と $t=T$ の間に働く場合の1自由度のハミルトニアン $H = p^2/(2M) - F(t)x$ について：力の変化 $\delta F(t)$ を考え，量子作用原理を使って，まず $\delta_F \langle p', T | x', 0 \rangle$ を求め，次に $\langle p', T | x', 0 \rangle$ を求めよ．

6-13b　$\langle x', T | p', 0 \rangle$ について，同様に答えよ．

6-13c　有限の時間変換はユニタリー発展演算子 U を用いて

$$\langle \ldots, T | = \langle \ldots, 0 | U$$

として得られる(問題5-2を参照)．U を $x = x(t=0)$ および $p = p(t=0)$ の関数と見なして，$\langle p', T | x', 0 \rangle$ から px 順の形，および $\langle x', T | p', 0 \rangle$ から xp 順の形となる U を求めよ．それらは以下のように書けることを示せ．

$$\begin{aligned} U &= \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{p^2}{2M}T}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p\Delta x}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}x\Delta p}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{2\hbar}\int_0^T \mathrm{d}t \int_0^T \mathrm{d}t'\, f(t) t_< F(t')/M} \\ &= \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}x\Delta p}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}p\Delta x}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{(p+\Delta p)^2}{2M}T}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{2\hbar}\int_0^T \mathrm{d}t \int_0^T \mathrm{d}t'\, f(t) t_> F(t')/M}\ . \end{aligned}$$

ここで $t_<$ および $t_>$ はそれぞれ時間 t と t' の早い方と遅い方を表し，

$$\Delta p = \int_0^T \mathrm{d}t\, F(t)\,, \qquad \Delta x = -\int_0^T \mathrm{d}t\, \frac{t}{M} F(t)$$

と簡略化して書いた．Δp および Δx の物理的な意味は何か？

6-13d　U のどちらかの形を用いて，$x(T) = U^\dagger x U$ および $p(T) = U^\dagger p U$ を確かめよ．

6-13e　U を指数関数の積ではなく，1個のエルミート演算子の指数関数で表せ(ヒント：問題1-55を参照)．時間に依存しない F に対して，正しい答えが得られることを

示せ．

6-14a　銀(Ag)原子が，並んで設置されたシュテルン・ゲルラッハの実験用の磁石中を通っていく．これは原子ビームをまず2本に分割し，そして一緒にするというシュテルン・ゲルラッハの干渉計である．簡単のために y 軸に沿った縦方向の運動を古典的に扱い $y \to vt$ とし，x 方向の運動は無視する．そして磁場の z 成分だけが関与し，問題とする領域では z は十分小さくて

$$\boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{B} = \mu \boldsymbol{\sigma} \cdot \boldsymbol{B} \cong \mu \sigma_z B_z(y,z) \cong \mu \sigma_z \left[B_z(y,0) + z \frac{\partial B_z}{\partial z}(y,0) \right]_{y \to vt}$$

と近似できるとする．このときハミルトニアン $H = \boldsymbol{p}^2/(2M) - \boldsymbol{\mu} \cdot \boldsymbol{B}$ は実質的に

$$H = \frac{p_z^2}{2M} + \sigma_z \left[\hbar \Omega(t) - F(t) z \right]$$

と書けることを示せ．ここで歳差運動の角振動数 $\Omega(t)$ と力 $F(t)$ は時間 $t=0$ の前と，$t=T$ の後では消えるとする．$t=0$ で磁石中に入る以前は，原子は $\sigma_x = 1$ のスピン状態にあったとし，空間的には確率演算子 $P(z, p_z)$ で特定される状態だったとする．問題 6-13 で得られた結果を使って次の式を示せ．

$$\left| \left\langle \boldsymbol{\sigma}(T) \right\rangle \right|^2 = \left| \mathrm{tr} \left\{ P(z, p_z) \, \mathrm{e}^{2\mathrm{i}(p_z \Delta z \, - \, z \Delta p_z)/\hbar} \right\} \right|^2 .$$

ここで Δz および Δp_z は，そこで与えられたのと同様に定義されているとする．

6-14b　理想的な再統合は $\Delta z = 0$ および $\Delta p_z = 0$ の場合に達成されるだろう．もし実験者が $\left| \left\langle \boldsymbol{\sigma}(T) \right\rangle \right| \geq 0.9$ で満足するとすれば，容認できる制御不可能な Δz および Δp_z の誤差はどの程度か？（ヒント：問題 2-16 を参照）．そして結論は？

6-15　V_0, F, ω^2 を定数とする，1自由度のハミルトニアン $H = p^2/(2M) + V_0 - Fx + \frac{1}{2} M \omega^2 x^2$ について：$V_0 = 0$, $F = 0$, $\omega^2 \neq 0$ に対する，すでに知られた変換関数を用いて次の式を導け．

$$\begin{aligned} \left\langle x', t \middle| x'' \right\rangle = \sqrt{\frac{M\omega}{2\pi \mathrm{i} \hbar \sin(\omega t)}} \, & \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \frac{M\xi^2}{2t} \left[\frac{1}{2}\omega t \cot(\frac{1}{2}\omega t) \right]} \\ & \times \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(V_0 - F\overline{x} + \frac{1}{2} M \omega^2 \overline{x}^2) t} \\ & \times \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(M\omega^3)^{-1}(F - M\omega^2 \overline{x})^2 \left[\tan(\frac{1}{2}\omega t) - \frac{1}{2}\omega t \right]} . \end{aligned}$$

ここで $\overline{x} = \frac{1}{2}(x' + x'')$, $\xi = x' - x''$ である．F または ω^2 がゼロとなる極限ではどうなるか確かめよ．また $\omega^2 < 0$ のときはどうなるか？

6-16a　任意のポテンシャル $V(x)$ を持つ1自由度のハミルトニアン $H = p^2/(2M) +$

$V(x)$ について：粒子は短い時間間隔の間には遠くへは行かないとする．このことを念頭に置いて，$V(x)$ に対して局所振動子近似を使い

$$V(x) \cong V(\overline{x}) + (x-\overline{x})\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}(\overline{x}) + \frac{1}{2}(x-\overline{x})^2\frac{\mathrm{d}^2V}{\mathrm{d}x^2}(\overline{x})$$

と展開する．ここで始めと終わりの位置 x'' と x' の中間の点 $\overline{x} = \frac{1}{2}(x'+x'')$ を展開の基点とする．問題 6-15 の結果を使って，短い時間に適用できる時間変換関数の近似式を求めると以下のようになることを示せ．

$$\langle x',t|x''\rangle \cong \underbrace{\sqrt{\frac{M}{2\pi\mathrm{i}\hbar t}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{M\xi^2}{2t}}}_{\text{自由粒子}}\left(1+\tfrac{1}{12}\overline{\omega^2}t^2\right)\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{t}{24}M\overline{\omega^2}\xi^2}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\overline{V}t}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\frac{\overline{F}^2t^3}{24M}}\ .$$

ここで $\overline{V} = V(\overline{x})$, $\overline{F} = -\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}x}(\overline{x})$,$M\overline{\omega^2} = \frac{\mathrm{d}^2V}{\mathrm{d}x^2}(\overline{x})$ および $\xi = x' - x''$ とする．

6-16b　上記の結果を 3 次元のハミルトニアン $H = \boldsymbol{p}^2/(2M) + V(\boldsymbol{r})$ で記述される運動に一般化せよ．

6-17a　問題 6-16a において，$x' = x'' = \overline{x}$ として，$\langle\overline{x}|\exp(-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Ht)|\overline{x}\rangle$ に対する近似の結果を使って，次の式が H の関数のトレースに対する近似となっていることを示せ．

$$\mathrm{tr}\,\{f(H)\} \cong \int\frac{\mathrm{d}\overline{x}\,\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}\int\mathrm{d}\sigma\,\mathrm{Ai}(\sigma)f\Big(\frac{p^2}{2M}+\overline{V}-\frac{\sigma}{2}\big[(\hbar^2/M)\big(\overline{F}^2-2p^2\overline{\omega^2}\big)\big]^{\frac{1}{3}}\Big)\ .$$

6-17b　エアリー関数の性質と部分積分を使って，半古典的な位相積分に対する主要な量子補正は

$$\mathrm{tr}\,\{f(H)\} \cong \underbrace{\int\frac{\mathrm{d}\overline{x}\,\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}f\Big(\frac{p^2}{2M}+\overline{V}\Big)}_{\text{半古典的項}} - \underbrace{\int\frac{\mathrm{d}\overline{x}\,\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}\frac{\hbar^2\overline{\omega^2}}{24}f''\Big(\frac{p^2}{2M}+\overline{V}\Big)}_{\text{主要な量子補正項}}$$

となることを示せ．ここで $''$ は関数 $f(\ )$ の変数に関する微分を表す．

6-18　一定の力が働く系でのエネルギー状態の多重度についての再考：式(6.4.16)の位相積分について，まず**最初に** x に関して，$-\infty$ から ∞ まで積分する．そして p の積分を $|p| < P$ の領域に限って行う．その結果として得られる状態密度が式(6.4.22)で与えられているのと等価であることを示せ．

6-19　一定の力 F が働くハミルトニアン $H = p^2/(2M) - Fx$ の関数 $f(H)$ に対して，

$$\mathrm{tr}\,\{f(H)\} = \int\frac{\mathrm{d}x'\,\mathrm{d}p'}{2\pi\hbar}f\Big(\frac{p'^2}{2M}-Fx'\Big)$$

となることを示せ．式(6.4.16)のトレースを求めるときになぜこれを用いなかったのか?

6-20　次の式が成り立つことを証明せよ．

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\sigma\, \sigma\, \mathrm{Ai}(\sigma) = 0\,, \qquad \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\sigma\, \sigma^2\, \mathrm{Ai}(\sigma) = 0\,,$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\sigma\, \sigma^3\, \mathrm{Ai}(\sigma) = 2\,.$$

6-21　$\mathrm{Ai}'(0)$ を $\mathrm{Ai}(0)$ と同じように計算し，次の式を示せ(階乗関数の基本的性質が必要となる)．

$$-\,\mathrm{Ai}(0)\,\mathrm{Ai}'(0) = \frac{3^{-\frac{1}{2}}}{2\pi}\,.$$

6-22　次の式

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\sigma\ \mathrm{Ai}(\sigma) = 1$$

は知っている．以下のそれぞれの値はいくらになるか求めよ．

$$\int_{0}^{\infty} \mathrm{d}\sigma\ \mathrm{Ai}(\sigma) \quad \text{および} \quad \int_{-\infty}^{0} \mathrm{d}\sigma\ \mathrm{Ai}(\sigma)\,.$$

6-23　$\mathrm{Ai}(\sigma)$ に関する定理：次の関係式が成り立つ．

$$\left[\,\mathrm{Ai}(\sigma)\right]^2 = \frac{1}{2\pi}\int_{2^{2/3}\sigma}^{\infty} \mathrm{d}\tau\ \mathrm{Ai}(\tau)\frac{1}{\sqrt{2^{-2/3}\tau-\sigma}}\,.$$

$\left[\,\mathrm{Ai}(\sigma)\right]^2 (-\sigma \gg 1)$ について，もし $-\sigma$ を積分に寄与する重要な値 τ に比べて十分大きいとすると，どのようなことが言えるか？

6-24　問題 6-23 の定理の証明のために，まず

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y\, \delta\bigl(a-y^2\bigr) = \begin{cases} 0 & (a<0)\,, \\ \frac{1}{\sqrt{a}} & (a>0) \end{cases}$$

を示せ．そしてこの式と式(6.4.13)を用いて次の式を示せ．

$$\frac{1}{2\pi}\int_{2^{2/3}\sigma}^{\infty} \mathrm{d}\tau\, \frac{\mathrm{Ai}(\tau)}{\sqrt{2^{-2/3}\tau-\sigma}} = \int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}x}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}y}{2\pi}\ \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{12}x^3 - \mathrm{i}xy^2 - \mathrm{i}\sigma x}\,.$$

ここで新しい積分変数 $x = \tau_1 + \tau_2$ および $y = \frac{1}{2}(\tau_1 - \tau_2)$ を導入して進めよ．

6-25　式(6.6.11)の波動関数 $\psi_E(x)$ の直交性と完全性は関係式

$$\int \mathrm{d}\sigma\ \mathrm{Ai}(\sigma-\sigma_1)\,\mathrm{Ai}(\sigma-\sigma_2) = \delta(\sigma_1-\sigma_2)$$

を意味することを示せ．これはエアリー関数の完全性と直交性である．これを直接示せ．

6-26a　$\mathrm{Ai}(\sigma)$ の定義である積分表示を用いて次の式を示せ.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\sigma\ \mathrm{Ai}(\sigma)\,\mathrm{Ai}(-\sigma) = 2^{-\frac{1}{3}}\,\mathrm{Ai}(0)\,.$$

6-26b　議論を拡張して次の式を示せ.

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau\ \mathrm{Ai}(\sigma+\tau)\,\mathrm{Ai}(\sigma-\tau)\,\mathrm{e}^{2\mathrm{i}k\tau} = 2^{-\frac{1}{3}}\,\mathrm{Ai}\big(2^{\frac{2}{3}}(\sigma+k^2)\big)\,.$$

6-26c　上の関係式が矛盾していないことを確かめるために，まず

$$\left[\frac{\partial^2}{\partial\sigma^2}+\frac{\partial^2}{\partial\tau^2}\right]\big[\,\mathrm{Ai}(\sigma+\tau)\,\mathrm{Ai}(\sigma-\tau)\big] = 4\sigma\,\mathrm{Ai}(\sigma+\tau)\,\mathrm{Ai}(\sigma-\tau)$$

を証明し，次に上記の前問の積分の式に対する微分方程式を導け.

6-27　問題 6-23 の定理より，

$$\big[\,\mathrm{Ai}(0)\big]^2 = \frac{2^{-2/3}}{\pi}\int_0^{\infty}\frac{\mathrm{d}\tau}{\sqrt{\tau}}\ \mathrm{Ai}(\tau)$$

を得る．この積分を実行して

$$\big[\,\mathrm{Ai}(0)\big]^2 = \frac{1}{\pi^{3/2}}\,\frac{1}{2^{5/3}}\,\frac{1}{3^{5/6}}\,\big(-\tfrac{5}{6}\big)!$$

を導け．この結果は数値的に一致しているか？

6-28　問題 6-23 の定理より次の式を導け.

$$-\,\mathrm{Ai}(0)\,\mathrm{Ai}'(0) = -\frac{1}{2\pi}\int_0^{\infty}\frac{\mathrm{d}\tau}{\sqrt{\tau}}\ \mathrm{Ai}'(\tau)\,.$$

積分を実行して問題 6-21 の結果と同じになることを確かめよ.

6-29　式(6.4.19)における x の無限大までの積分を式(6.4.20)での有限の大きさまでの積分に置き換えて，σ および x の積分をこの順序で実行し次の式を導け.

$$\mathrm{tr}\left\{\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Ht}\right\}_L = \int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}E\ m_L(E)\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Et}$$

ここで

$$m_L(E) = \left(\frac{2M}{\hbar^2F^2}\right)^{\frac{1}{3}}\left(\big[\,\mathrm{Ai}'(\sigma)\big]^2 - \sigma\big[\,\mathrm{Ai}(\sigma)\big]^2\right)_{\sigma=(2MF/\hbar^2)^{\frac{1}{3}}(-E/F-L)}$$

である．そして式(6.4.22)は式(6.4.21)の状況のもとで適用できることを示せ.

6-30　一定の角振動数 ω を持つ 1 自由度のハミルトニアン $H=p^2/(2M)+\frac{1}{2}M\omega^2x^2$

について：作用原理を用いて $\langle p',t|x'\rangle$ を求めよ．運動量表示の波動関数 $\psi_n(p')$ を同定できるか？ もし便利だと思うなら，無次元の変数を導入して行え．

6-31　$E>0$ の場合に，式(6.6.7)の $F\to 0$ の極限値を求めるために，まず $p=\pm\sqrt{2ME}+\bar{p}$ として，$\bar{p}$ に依存しない位相因子を無視すると(なぜそうしてよいのか?)

$$\psi_{E,\pm}(p)=\frac{1}{\sqrt{\mp \mathrm{i}2\pi\hbar F}}\,\mathrm{e}^{\mp\frac{\mathrm{i}}{\hbar F}\sqrt{E/(2M)}\,\bar{p}^2}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar F}\frac{\bar{p}^3}{6M}}$$

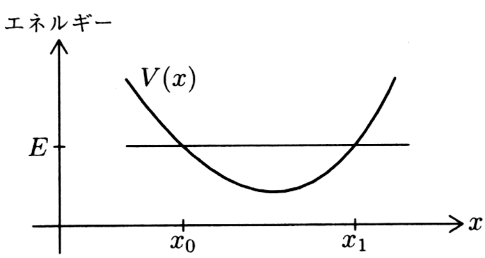
となる．次に $F\to 0$ の極限で

$$\frac{1}{\sqrt{\mp \mathrm{i}2\pi\hbar F}}\,\mathrm{e}^{\mp\frac{\mathrm{i}}{\hbar F}\sqrt{E/(2M)}\,\bar{p}^2}\to\left(2E/M\right)^{-\frac{1}{4}}\delta(\bar{p})$$

となることを示せ．この極限においては $\bar{p}^3/F\sim\sqrt{F}$ であることに注意せよ．この結果が式(6.6.3)の $\psi_{E,\pm}(p)$ と一致することを示せ．

6-32　n 番目の調和振動子の状態の古典的な回帰点は $q=\pm\sqrt{2n+1}$ (無次元の変数を使う)となることを確かめよ．WKB 近似を用いて，古典的に禁止される領域 $q>\sqrt{2n+1}$ での波動関数を $q\gg\sqrt{2n+1}$ の条件のもとでの指数関数の展開で主要な 2 項まで考慮して求めよ．すでに知られている波動関数の漸近形とこの結果を比較せよ．

6-33　古典的に許される領域が右側にある場合の WKB 近似はすでに知られているものとする．古典的に許される領域が左側にある場合の WKB の波動関数を見出せ．どのような方法を用いてもよい．次に，古典的な回帰点が 2 個ある場合のポテンシャル $V(x)$ について考察しよう．



$x>x_0$ の領域と $x<x_1$ の領域に対して WKB の波動関数を書け．そして共通の領域 $x_0<x<x_1$ においてはこれらの波動関数が位相を除いて同じであるという条件より

$$\frac{1}{\pi\hbar}\int_{x_0}^{x_1}\mathrm{d}x\,\sqrt{2M[E_n-V(x)]}=n+\tfrac{1}{2}\qquad ただし\quad n=0,1,2,\ldots$$

を導け．これが WKB 近似でのエネルギー固有値 E_n を決める関係式である．

6-34a　調和振動子のポテンシャル $V(x)=\frac{1}{2}M\omega^2x^2$ に対して，問題 6-33 の結果を

適用して可能なエネルギーの値を求めよ．そしてすでに知られている結果と比較せよ．

6-34b　線形なポテンシャル $V(x) = F|x|$ に対して同様の考察をせよ．

6-35a　問題 6-33 の WKB 近似のエネルギーのまったく異なる導出方法について：問題 6-17b の近似的なトレースの計算方法を以下の式に適用せよ．

$$f_E(H) = \begin{cases} 1 & (H < E)\ , \\ 0 & (H > E) \end{cases}$$

この $\mathrm{tr}\,\{f_E(H)\}$ はエネルギー E よりも低いエネルギー固有状態の数である．そこでこの半古典近似で得られた $\mathrm{tr}\,\{f_{E_n}(H)\}$ を $n + \frac{1}{2}$（なぜこれが道理にかなっているのか?）と等しいとすることで，WKB 近似による量子化の規則が導出できることを示せ．

6-35b　問題 6-17b の量子補正項を考慮して，WKB の量子化則を改良せよ．そして振動子ポテンシャル $V(x) = \frac{1}{2}M\omega^2 x^2$ および線型ポテンシャル $V(x) = F|x|$ に対して補正項を求めよ．後者に対する結果と式(6.10.12)を比較せよ．

6-36　式(6.11.8)での試行関数としてスケール変換された $\psi_\lambda(q) = \psi(\lambda q)$ を考える．どのような λ が $\mathcal{E}_0$ に対する最も低い上限を与えるか？ これより式(6.11.8)に対応するスケール不変な関係式を導け．そして $\psi(q) = \exp(-q^\alpha)\,(\alpha = \frac{3}{2}, \frac{7}{4}, 2)$ に対して適用してみよ．

第7章

調和振動子

7.1 非エルミート演算子

ここでは，より一般的な動力学的状況に目を向けるために，調和振動子の問題を非エルミート演算子を使って扱ってみよう．簡単のために，通常の次元を持った変数 x, p_x の代わりに，無次元の変数 q, p およびそれらと密接に関係している非エルミートな変数 $y, y^\dagger$ を用いる．

$$
\begin{aligned}
x =& \sqrt{\frac{\hbar}{M\omega}}\, q \longrightarrow q = \frac{1}{\sqrt{2}}\left(y^\dagger + y\right) , \\
p_x =& \sqrt{\hbar M\omega}\, p \longrightarrow p = \frac{\mathrm{i}}{\sqrt{2}}\left(y^\dagger - y\right) , \\
& \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[x, p_x\right] = \frac{1}{\mathrm{i}}\left[q, p\right] = 1 . \qquad \left[y, y^\dagger\right] = 1 .
\end{aligned} \tag{7.1.1}
$$

するとエネルギーは角振動数を単位にして表され以下のようになる．

$$
\begin{aligned}
H = \frac{p_x^2}{2M} + \frac{1}{2}M\omega^2 x^2 &= \hbar\omega\left(\tfrac{1}{2}p^2 + \tfrac{1}{2}q^2\right) \\
&= \hbar\omega\left(y^\dagger y + \tfrac{1}{2}\right) \longrightarrow \omega y^\dagger y .
\end{aligned} \tag{7.1.2}
$$

ここでさらに，特に重要とは思われない定数 $\frac{1}{2}\hbar\omega \mathrel{\widehat{=}} \frac{1}{2}\omega$ を引いておくと，H の固有値は $0,\ \omega,\ 2\omega,\ \ldots$ となる．

交換関係 $[y, \mathrm{i}y^\dagger] = \mathrm{i}$ が $[q, p] = \mathrm{i}$ と類似しているから，ラグランジアン

$$
L = p\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}t} - H(q, p, t) \tag{7.1.3}
$$

以外に，次のラグランジアン

$$
\overline{L} = \mathrm{i}y^\dagger \frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} - H(y, y^\dagger, t) \tag{7.1.4}
$$

および，生成演算子 $G_q = p\,\delta q$ および $G_p = -q\,\delta p$ に類似した次の演算子を使うこと

が可能であろう．

$$G_y = \mathrm{i}y^\dagger\,\delta y\,, \qquad G_{y^\dagger} = -\mathrm{i}y\,\delta y^\dagger\,. \tag{7.1.5}$$

5.7節の結果にしたがうと，条件は，

$$L - \overline{L} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}w \tag{7.1.6}$$

であり，ここでいかなる時間 t においても

$$\begin{aligned}\delta w &= \big(G_q + G_t\big) - \big(G_y + \overline{G}_t\big)\\ &= (p\delta q - H\delta t) - (\mathrm{i}y^\dagger\delta y - \overline{H}\delta t)\end{aligned} \tag{7.1.7}$$

である．今扱っている変換は時間 t を含んでいないので，

$$\overline{H} = H\,, \qquad \text{したがって}\quad G_t = -H\,\delta t = -\overline{H}\,\delta t = \overline{G}_t \tag{7.1.8}$$

となり次の式を得る．

$$p\delta q - \mathrm{i}y^\dagger\delta y = \delta w(q, y)\,. \tag{7.1.9}$$

ここで

$$p = \mathrm{i}(q - \sqrt{2}\,y)\,, \qquad y^\dagger = \sqrt{2}\,q - y \tag{7.1.10}$$

だから，

$$\begin{aligned}\delta w &= \mathrm{i}(q - \sqrt{2}\,y)\delta q - \mathrm{i}(\sqrt{2}\,q - y)\delta y\\ &= \delta\left(\frac{\mathrm{i}}{2}q^2 + \frac{\mathrm{i}}{2}y^2 - \mathrm{i}\sqrt{2}\,qy\right)\end{aligned} \tag{7.1.11}$$

となる．この式は，

$$\begin{aligned}\delta\langle q'|y'\rangle &= \mathrm{i}\langle q'|(G_q - G_y)|y'\rangle = \mathrm{i}\langle q'|\delta w|y'\rangle\\ &= \mathrm{i}\langle q'|y'\rangle\,\delta\left(\frac{\mathrm{i}}{2}q'^2 + \frac{\mathrm{i}}{2}y'^2 - \mathrm{i}\sqrt{2}\,q'y'\right)\end{aligned} \tag{7.1.12}$$

より，直接変換関数 $\langle q'|y'\rangle$ を求めるのに適用できて，結果は以下のようになる．

$$\langle q'|y'\rangle = \pi^{-\frac{1}{4}}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q'^2 - \frac{1}{2}y'^2 + \sqrt{2}\,q'y'}\,. \tag{7.1.13}$$

これはベクトル $|y' = 0\rangle$ を規格化するための定数まで含めて，式(2.7.30)で得られているよく知られた結果である．

式(7.1.2)のハミルトニアンを使うと，非エルミート演算子に対して，

$$\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial \mathrm{i}y^\dagger} = -\mathrm{i}\omega y \tag{7.1.14}$$

および次の運動方程式が得られる．

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}y^\dagger}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial H}{\partial y} = -\omega y^\dagger \ . \tag{7.1.15}$$

これは明らかに簡単化されており，運動方程式は簡単に解けて以下のようになる．

$$y(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}y\ , \quad y^\dagger(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}y^\dagger \ . \tag{7.1.16}$$

さて，次に時間変換関数 $\langle y^{\dagger\prime}, t|y''\rangle$ について考えよう．

$$\begin{aligned}\delta\langle y^{\dagger\prime}, t|y''\rangle &= \mathrm{i}\langle y^{\dagger\prime}, t|\Big[\big(G_{y^\dagger} + G_t\big)(t) - G_y\Big]|y''\rangle \\ &= \mathrm{i}\langle y^{\dagger\prime}, t|\big[-\mathrm{i}\delta y^{\dagger\prime}y(t) - \delta t\,\omega y^\dagger y - \mathrm{i}y^\dagger\delta y''\big]|y''\rangle \ .\end{aligned} \tag{7.1.17}$$

ここで [ ] の部分は，

$$\begin{aligned}[\cdots] = -\mathrm{i}\delta y^{\dagger\prime}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\ &\underset{\displaystyle y''}{\underset{\downarrow}{y}}\ -\delta t\,\omega\ \underset{\displaystyle y^{\dagger\prime}}{\underset{\downarrow}{y^\dagger(t)}}\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\ \underset{\displaystyle y''}{\underset{\downarrow}{y}}\ -\mathrm{i}\ \underset{\displaystyle y^{\dagger\prime}}{\underset{\downarrow}{y^\dagger(t)}}\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\delta y'' \\ \to \delta\Big[-\mathrm{i}y^{\dagger\prime}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}y''\Big]&\end{aligned} \tag{7.1.18}$$

となり，次の式が得られる．

$$\langle y^{\dagger\prime}, t|y''\rangle = \mathrm{e}^{y^{\dagger\prime}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}y''} \ . \tag{7.1.19}$$

これは次の初期条件を満たす．

$$\langle y^{\dagger\prime}, t|y''\rangle \to \langle y^{\dagger\prime}|y''\rangle = \mathrm{e}^{y^{\dagger\prime}y''} \qquad (t\to 0) \ . \tag{7.1.20}$$

さて，ここで時間変換関数

$$\langle y^{\dagger\prime}, t|y''\rangle = \langle y^{\dagger\prime}|\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}tH}|y''\rangle \tag{7.1.21}$$

を使い，次の展開式

$$\mathrm{e}^{y^{\dagger\prime}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}y''} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{\left(y^{\dagger\prime}\right)^n}{\sqrt{n!}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\omega t}\frac{\left(y''\right)^n}{\sqrt{n!}} \tag{7.1.22}$$

と比較すると，固有値は，

$$H' = n\omega \qquad ただし \quad n = 0, 1, 2, \ldots \tag{7.1.23}$$

となり，固有ベクトルに対する波動関数は

$$\langle y^{\dagger\prime}|n\rangle = \frac{\left(y^{\dagger\prime}\right)^n}{\sqrt{n!}}\ , \qquad \langle n|y''\rangle = \frac{\left(y''\right)^n}{\sqrt{n!}} \tag{7.1.24}$$

となる．これはもちろんすでに知っている結果である．実際，2.9 節において基本的な数学の詳細については学んだ．そしてその結果はここでの ωt を $-\mathrm{i}\beta$ で置き換えれば

再現できる．

さらに，式(7.1.13)の変換関数より，

$$\langle q'|y'\rangle = \pi^{-\frac{1}{4}}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}q'^2 + \sqrt{2}\,q'y' - \frac{1}{2}y'^2} = \sum_{n=0}^{\infty}\psi_n(q')\frac{(y')^n}{\sqrt{n!}} \tag{7.1.25}$$

となり，$\langle q'|n\rangle = \psi_n(q')$ に対するエルミートの多項式が出てくる．この母関数を使って $\psi_n(q')$ の漸近形を導くことも可能である．この点に関しては問題 7-3 に回すとして，より一般的な動力学について考察していこう．

7.2　強制振動

次の時間に依存するハミルトニアンについて考えよう．

$$H = \omega y^\dagger y + \kappa(t)^* y + \kappa(t) y^\dagger\ . \tag{7.2.1}$$

これより運動方程式

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}y}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial y^\dagger} = \omega y + \kappa(t) \tag{7.2.2}$$

および

$$-\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}y^\dagger}{\mathrm{d}t} = \omega y^\dagger + \kappa(t)^* \tag{7.2.3}$$

を得る．これは外力を受けて運動する系を記述している．この1階の微分方程式を簡単に解くことができることは明らかである．ただこれらに伴う境界条件をまず認識することが重要である．系の時間発展は次の式で与えられる．

$$\langle y^{\dagger\prime}, t_1 | y'', t_2\rangle^\kappa\ . \tag{7.2.4}$$

ここで κ は，以下の外力のない場合($\kappa = 0$)と区別するために付けておいた．

$$\langle y^{\dagger\prime}, t_1 | y'', t_2\rangle = \mathrm{e}^{y^{\dagger\prime}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t_1 - t_2)}y''}\ . \tag{7.2.5}$$

これより次の式で与えられるように，外力が加わったときに $\langle 1|2\rangle^\kappa$ がどのように変化するかを問うのがごく自然であろう．

$$\delta_\kappa\langle 1|2\rangle^\kappa = \mathrm{i}\langle 1|\Big[-\int_2^1 \mathrm{d}t\ \left(\delta\kappa^*\, y + \delta\kappa\, y^\dagger\right)(t)\Big]|2\rangle\ . \tag{7.2.6}$$

ただし，もちろん $\langle 1| = \langle y^{\dagger\prime}, t_1|$ であり，$|2\rangle = |y'', t_2\rangle$ である．さて，ここで与えられた $y(t_2) \to y''$ を使って $y(t)$ を，そして与えられた $y^\dagger(t_1) \to y^{\dagger\prime}$ を使って $y^\dagger(t)$ を見つけよう．

そこで式(7.2.2)，またはそれを書き換えた式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\Big(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}y(t)\Big) = -\mathrm{i}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\kappa(t) \tag{7.2.7}$$

から出発しよう．これを解くと

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}y(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t_2}y(t_2) - \mathrm{i}\int_{t_2}^{t}\mathrm{d}t'\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t'}\kappa(t') \tag{7.2.8}$$

となり，次の式を得る．

$$y(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t - t_2)}y(t_2) - \mathrm{i}\int_{t_2}^{t}\mathrm{d}t'\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t - t')}\kappa(t')\ . \tag{7.2.9}$$

$y^\dagger(t)$ については，上の式のエルミート共役をとり，t_2 を t_1 とすればよい．

$$y^\dagger(t) = y^\dagger(t_1)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t_1 - t)} - \mathrm{i}\int_{t}^{t_1}\mathrm{d}t'\,\kappa(t')^*\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t' - t)}\ . \tag{7.2.10}$$

ここで便宜上ヘビサイド*の階段関数を導入しよう．

$$\eta(t - t') = \begin{cases} 1 & (t > t')\ , \\ 0 & (t < t')\ . \end{cases} \tag{7.2.11}$$

すると，積分は以下のように書ける．

$$\begin{aligned} \int_{t_2}^{t}\mathrm{d}t'\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t - t')}\kappa(t') &= \int_{t_2}^{t_1}\mathrm{d}t'\,\eta(t - t')\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t - t')}\kappa(t')\ , \\ \int_{t}^{t_1}\mathrm{d}t'\,\kappa(t')^*\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t' - t)} &= \int_{t_2}^{t_1}\mathrm{d}t'\,\kappa(t')^*\eta(t' - t)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t' - t)}\ . \end{aligned} \tag{7.2.12}$$

このようにして式(7.2.6)の積分は実質的に次のようになる．

$$\begin{aligned} &\int_{t_2}^{t_1}\mathrm{d}t\ \big(\delta\kappa^*\,y + \delta\kappa\,y^\dagger\big) \to \\ &\qquad \int_{t_2}^{t_1}\mathrm{d}t\,\delta\kappa(t)^*\left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t - t_2)}y'' - \mathrm{i}\int_{t_2}^{t_1}\mathrm{d}t'\,\eta(t - t')\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t - t')}\kappa(t')\right] \\ &+ \int_{t_2}^{t_1}\mathrm{d}t\ \left[y^{\dagger\prime}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t_1 - t)} - \mathrm{i}\int_{t_2}^{t_1}\mathrm{d}t'\,\kappa(t')^*\eta(t' - t)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t' - t)}\right]\delta\kappa(t)\ . \end{aligned} \tag{7.2.13}$$

または，最後の 2 重積分の部分で $t \leftrightarrow t'$ とすると，以下のように書ける．

$$\begin{aligned} &\int_{t_2}^{t_1}\mathrm{d}t\ \big(\delta\kappa^*\,y + \delta\kappa\,y^\dagger\big) \to \\ &\qquad \delta\left[\int_2^1\mathrm{d}t\,\kappa(t)^*\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t_2}y'' + \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t_1}y^{\dagger\prime}\int_2^1\mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\kappa(t)\right. \\ &\qquad\qquad \left. -\mathrm{i}\int_2^1\mathrm{d}t\,\mathrm{d}t'\,\kappa(t)^*\eta(t - t')\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t - t')}\kappa(t')\right]\ . \end{aligned} \tag{7.2.14}$$

---

*Oliver HEAVISIDE (1850–1925)

上記の関係式よりすぐに時間変換関数が次の式で与えられることがわかる．

$$\begin{aligned}\langle y^{\dagger\prime}, t_1 | y'', t_2\rangle^\kappa = & \, \mathrm{e}^{y^{\dagger\prime}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t_1 - t_2)}y''} \\ & \times\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}y^{\dagger\prime}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t_1}\int_2^1 \mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\kappa(t)} \\ & \times\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\int_2^1 \mathrm{d}t\,\kappa(t)^*\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t_2}y''} \\ & \times\ \mathrm{e}^{-\int_2^1 \mathrm{d}t\,\mathrm{d}t'\,\kappa(t)^*\eta(t-t')\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')}\kappa(t')}\ . \end{aligned} \tag{7.2.15}$$

上の式の右辺の最初の部分は $\langle y^{\dagger\prime}, t_1 | y'', t_2\rangle$，つまり $\kappa \equiv 0$ で外力が無い場合の時間変換関数であり，最後の部分は $y'' = 0 \to y^{\dagger\prime} = 0$ への強制振動の遷移振幅 $\langle 0, t_1 | 0, t_2\rangle^\kappa$ である．これを以下のように書いておくと，このような見解をはっきりと反映している．

$$\langle y^{\dagger\prime}, t_1 | y'', t_2\rangle^\kappa = \langle y^{\dagger\prime}, t_1 | y'', t_2\rangle\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}[y^{\dagger\prime}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t_1}\gamma + \gamma^*\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t_2}y'']}\langle 0, t_1 | 0, t_2\rangle^\kappa\ . \tag{7.2.16}$$

ただし

$$\gamma = \int_2^1 \mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\kappa(t)\ , \qquad \gamma^* = \int_2^1 \mathrm{d}t\,\kappa(t)^*\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} \tag{7.2.17}$$

である．

7.2.1　時間に依存しない外力

まず初めに外力が時間に依らない場合について調べてみよう．$\kappa(t)$ と書いたが，これはもちろん時間 t に依らない κ も含んでいる．

$$\begin{aligned} H &= \omega y^\dagger y + \kappa^* y + \kappa y^\dagger \\ &= \omega\left(y^\dagger + \frac{\kappa}{\omega}\right)\left(y + \frac{\kappa}{\omega}\right) - \frac{|\kappa|^2}{\omega} \\ &= \omega(y^\dagger + \lambda^*)(y + \lambda) - \omega|\lambda|^2 \quad \text{ただし}\ \ \lambda \equiv \kappa/\omega\ . \end{aligned} \tag{7.2.18}$$

最後の式の演算子の部分は，互いにエルミート共役の関係にあり，以下の交換関係にしたがう．

$$[y + \lambda, y^\dagger + \lambda^*] = 1\ . \tag{7.2.19}$$

したがって，固有値は次のようになることがすぐにわかる．

$$E_n^\kappa = n\omega - \frac{|\kappa|^2}{\omega} = (n - |\lambda|^2)\omega\ . \tag{7.2.20}$$

つまり定数だけ低くなっている．固有ベクトルは以下のようになるのは明らかである．

$$|n, \lambda\rangle = \frac{(y^\dagger + \lambda^*)^n}{\sqrt{n!}}|0, \lambda\rangle\ , \qquad (y + \lambda)\,|0, \lambda\rangle = 0\ . \tag{7.2.21}$$

ここで

$$y + \lambda = \mathrm{e}^{-\lambda y^\dagger} y \,\mathrm{e}^{\lambda y^\dagger} \tag{7.2.22}$$

を使うと

$$y\,\mathrm{e}^{\lambda y^\dagger} \big|0, \lambda\big\rangle = 0 \tag{7.2.23}$$

を得る．これより

$$\big|0, \lambda\big\rangle = \frac{\mathrm{e}^{-\lambda y^\dagger} \big|0\big\rangle}{\sqrt{\big\langle 0\big|\,\mathrm{e}^{-\lambda^* y}\,\mathrm{e}^{-\lambda y^\dagger}\big|0\big\rangle}} \tag{7.2.24}$$

となる．ここで分母は規格化するための係数であり，具体的な値は次のようになる．

$$\big\langle 0\big|\,\mathrm{e}^{-\lambda^* y}\,\mathrm{e}^{-\lambda y^\dagger}\big|0\big\rangle = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{|\lambda|^{2n}}{n!} = \mathrm{e}^{|\lambda|^2}\,. \tag{7.2.25}$$

これを代入すると

$$\big|0, \lambda\big\rangle = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|\lambda|^2}\,\mathrm{e}^{-\lambda y^\dagger}\big|0\big\rangle \tag{7.2.26}$$

と書け，$\big|n, \lambda\big\rangle$ の形より，波動関数は以下のようになる．

$$\big\langle y^{\dagger\prime}\big|n, \lambda\big\rangle = \frac{\left(y^{\dagger\prime} + \lambda^*\right)^n}{\sqrt{n!}}\,\mathrm{e}^{-\lambda y^{\dagger\prime}}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|\lambda|^2}\,. \tag{7.2.27}$$

式(7.2.15)の時間変換関数は，$\kappa(t) = \kappa\,\big(= \omega\lambda\big)$ に対して上記の結果を与えるだろうか？ まず次の式

$$\gamma = \int_{t_2}^{t_1} \mathrm{d}t\;\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\kappa = -\mathrm{i}\lambda\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t_1} - \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t_2}\right)\,,$$
$$\gamma^* = \int_{t_2}^{t_1} \mathrm{d}t\,\kappa^*\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t} = \mathrm{i}\lambda^*\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t_1} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t_2}\right) \tag{7.2.28}$$

および

$$\begin{aligned}\int_{t_2}^{t_1} \mathrm{d}t\,\mathrm{d}t'\,\kappa^*\eta(t-t')\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')}\kappa &= -\mathrm{i}\omega|\lambda|^2 \int_{t_2}^{t_1} \mathrm{d}t\,\left(1 - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t_2)}\right)\\ &= -\mathrm{i}\omega|\lambda|^2\left[T + \frac{1}{\mathrm{i}\omega}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega T} - 1\right)\right]\end{aligned} \tag{7.2.29}$$

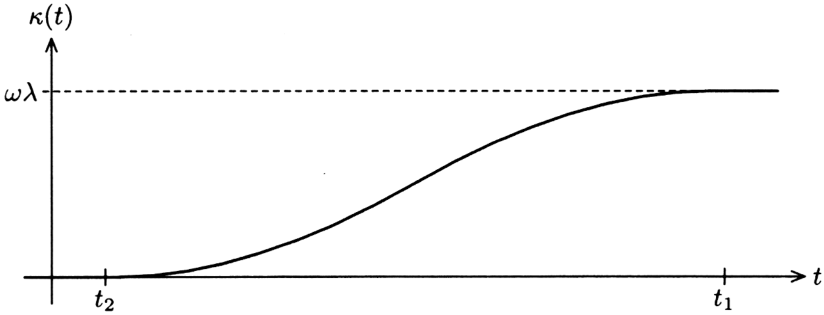
に注意しよう．ただし $T = t_1 - t_2$ とおいた．したがって以下のようになる．

$$\begin{aligned}\big\langle y^{\dagger\prime}, t_1\big|y'', t_2\big\rangle^\kappa &= \mathrm{e}^{y^{\dagger\prime}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega T} y'' - \lambda(1 - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega T})y^{\dagger\prime} - \lambda^*(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega T} - 1)y''}\\ &\quad\times\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}|\lambda|^2[\omega T - \mathrm{i}(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega T} - 1)]}\\ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega|\lambda|^2 T}\,\mathrm{e}^{-y^{\dagger\prime}\lambda}\,\mathrm{e}^{(y^{\dagger\prime} + \lambda^*)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega T}(y'' + \lambda)}\,\mathrm{e}^{-\lambda^* y''}\,\mathrm{e}^{-|\lambda|^2}\\ &= \sum_{n=0}^{\infty}\big\langle y^{\dagger\prime}\big|n, \lambda\big\rangle\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n^\kappa T}\big\langle n, \lambda\big|y''\big\rangle\,.\end{aligned} \tag{7.2.30}$$

これは確かに時間変換関数の形をしている．固有値 E_n^κ は式(7.2.20)と一致しており，$\langle y^{\dagger\prime}|n,\lambda\rangle$ は式(7.2.27)の波動関数であり，そして $\langle n,\lambda|y''\rangle$ はそれらのエルミート共役である．

7.2.2　ゆっくり変化する外力

次に，$\kappa(t)$ が時間 t_2 から t_1 の間に，ゆっくりと 0 から $\omega\lambda$ に変化していく場合について考えよう．



$$\omega(t_1-t_2)\gg 1\ ,\quad \left|\frac{1}{\omega^2}\frac{\mathrm{d}^2\kappa(t)}{\mathrm{d}t^2}\right|\ll|\kappa(t)|\ ,\quad \frac{\mathrm{d}\kappa}{\mathrm{d}t}=0\quad (t<t_2 \text{ および } t>t_1)\ . \tag{7.2.31}$$

このとき何が起こるだろうか？ 式(7.2.15)の積分を部分積分を使って求めていこう．まず最初に以下のことに注意しよう．

$$\begin{aligned}\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\kappa(t)&=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}}{\mathrm{i}\omega}\kappa(t)-\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}}{(\mathrm{i}\omega)^2}\frac{\mathrm{d}\kappa}{\mathrm{d}t}(t)\right]+\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}}{(\mathrm{i}\omega)^2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\kappa(t)\ ,\\ &\cong\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}}{\mathrm{i}\omega}\kappa(t)+\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}}{\omega^2}\frac{\mathrm{d}\kappa}{\mathrm{d}t}(t)\right]\ .\end{aligned} \tag{7.2.32}$$

すると次の式

$$\gamma=\int_2^1\mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\kappa(t)\cong\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t_1}}{\mathrm{i}\omega}\kappa(t_1)=-\mathrm{i}\lambda\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t_1} \tag{7.2.33}$$

および

$$\gamma^*=\int_2^1\mathrm{d}t\,\kappa(t)^*\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\cong\mathrm{i}\lambda^*\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t_1} \tag{7.2.34}$$

を得る．さらに以下においても同じ近似を用いる．

$$\int_2^1 \mathrm{d}t\,\mathrm{d}t'\,\kappa(t)^*\eta(t-t')\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')}\kappa(t')$$
$$\cong \int_{t_2}^{t_1} \mathrm{d}t\,\kappa(t)^* \int_{t_2}^{t} \mathrm{d}t'\,\frac{\partial}{\partial t'}\left[\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')}}{\mathrm{i}\omega}\kappa(t)+\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')}}{\omega^2}\frac{\mathrm{d}\kappa}{\mathrm{d}t}(t)\right]$$
$$=\frac{1}{\omega^2}\int_{t_2}^{t_1}\mathrm{d}t\left[-\mathrm{i}\omega|\kappa(t)|^2+\kappa(t)^*\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\kappa(t)\right]. \tag{7.2.35}$$

次の式

$$|\kappa(t)|^2=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left[t|\kappa(t)|^2\right]-t\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\kappa(t)|^2 \tag{7.2.36}$$

および

$$\kappa(t)^*\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\kappa(t)=\underbrace{\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}|\kappa(t)|^2}_{\text{実数部}}+\underbrace{\frac{1}{2}\left[\kappa(t)^*\frac{\mathrm{d}\kappa}{\mathrm{d}t}(t)-\frac{\mathrm{d}\kappa(t)^*}{\mathrm{d}t}\kappa(t)\right]}_{\text{虚数部}} \tag{7.2.37}$$

を用いると，以下のようになる．

$$\int_2^1 \mathrm{d}t\,\mathrm{d}t'\,\kappa(t)^*\eta(t-t')\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')}\kappa(t')$$
$$\cong -\mathrm{i}\frac{t_1}{\omega}|\kappa(t_1)|^2+\frac{1}{2\omega^2}|\kappa(t_1)|^2-\mathrm{i}\phi$$
$$=-\mathrm{i}\omega t_1|\lambda|^2+\frac{1}{2}|\lambda|^2-\mathrm{i}\phi. \tag{7.2.38}$$

ここで実の位相 ϕ は次の式で与えられる．

$$\phi=\int_2^1\mathrm{d}t\left[\frac{\mathrm{i}}{2\omega}\left(\kappa^*\frac{\mathrm{d}\kappa}{\mathrm{d}t}-\frac{\mathrm{d}\kappa^*}{\mathrm{d}t}\kappa\right)-\frac{t}{\omega}\left(\kappa^*\frac{\mathrm{d}\kappa}{\mathrm{d}t}+\frac{\mathrm{d}\kappa^*}{\mathrm{d}t}\kappa\right)\right]. \tag{7.2.39}$$

したがって，式(7.2.15)の時間変換関数は近似的に次のようになる．

$$\langle y^{\dagger\prime},t_1|y'',t_2\rangle^\kappa=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t_1|\lambda|^2}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|\lambda|^2}\,\mathrm{e}^{-y^{\dagger\prime}\lambda}\,\mathrm{e}^{(y^{\dagger\prime}+\lambda^*)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t_1-t_2)}y''}$$
$$=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\sum_{n=0}^{\infty}\underbrace{\frac{\left(y^{\dagger\prime}+\lambda^*\right)^n}{\sqrt{n!}}\,\mathrm{e}^{-y^{\dagger\prime}\lambda}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|\lambda|^2}}_{=\langle y^{\dagger\prime}|n,\lambda\rangle}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(n-|\lambda|^2)\omega t_1}$$
$$\times\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}n\omega t_2}\underbrace{\frac{\left(y''\right)^n}{\sqrt{n!}}}_{=\langle n|y''\rangle}. \tag{7.2.40}$$

つまり，以下の形に書ける．

$$\langle y^{\dagger\prime},t_1|y'',t_2\rangle^\kappa=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\sum_{n=0}^{\infty}\underbrace{\langle y^{\dagger\prime}|n,\lambda\rangle\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_n^\kappa t_1}}_{=\langle y^{\dagger\prime},t_1|n,\lambda\rangle}\times\underbrace{\mathrm{e}^{\mathrm{i}E_n t_2}\langle n|y''\rangle}_{=\langle n|y'',t_2\rangle}. \tag{7.2.41}$$

一般的には t_2 でのエネルギー固有状態，および時間 t_1 での異なるエネルギー状態を導入して

$$\langle y^{\dagger\prime}, t_1 | y'', t_2 \rangle^{\kappa} = \sum_{n,n'=0}^{\infty} \langle y^{\dagger\prime}, t_1 | n, \lambda \rangle \langle n, \lambda | n' \rangle \langle n' | y'', t_2 \rangle \tag{7.2.42}$$

のように書くことができる．これより

$$\langle n, \lambda | n' \rangle = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi} \delta(n, n') \, . \tag{7.2.43}$$

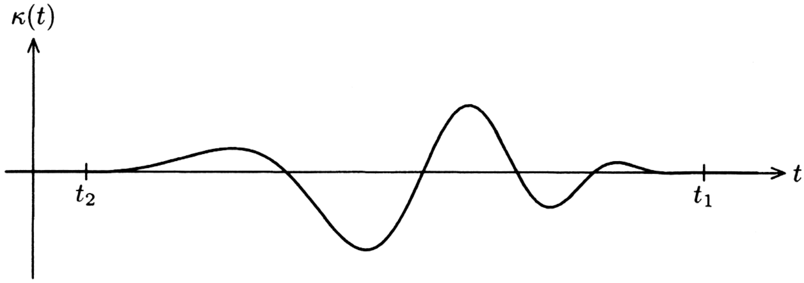
つまり

$$\left| \langle n, \lambda | n' \rangle \right|^2 = \delta(n, n') \tag{7.2.44}$$

を得る．したがって系は，外力が t_2 から t_1 の間にゆっくりと $\kappa = 0$ から $\kappa = \omega\lambda$ へ変化し，エネルギー固有値が $-|\kappa(t_1)|^2/\omega = -\omega|\lambda|^2$ だけ変化しているにもかかわらず，必ず同じ量子数 n を持つ状態に見出される．

7.2.3　一時的な外力

ここでは次の図に示されているように，κ が時間 t_2 以前ではゼロで，その時点から外力が加わり始め時間 t_1 で除かれ，それ以降においてゼロである状況について考えよう．



つまり κ は

$$\kappa = 0 \quad (t < t_2 \text{ および } t > t_1) \tag{7.2.45}$$

であるが，その間では任意とする．まず最初の例として，式(7.2.15)で $y^{\dagger\prime} = 0,\ y'' = 0$ とすると，次の式を得る．

$$\langle 0, t_1 | 0, t_2 \rangle^{\kappa} = \mathrm{e}^{-\int_2^1 \mathrm{d}t\, \mathrm{d}t'\, \kappa(t)^* \eta(t-t')\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')} \kappa(t')} \, . \tag{7.2.46}$$

さてここで，もし系が時間 t_2 において $n = 0$ の状態にあったとし，時間 t_1 においても，その間に介入する外力 κ にもかかわらず $n = 0$ の状態にいる確率はいくらだろう

か？ という問いに対する答えは次のようになる．

$$p(0,0)^\kappa = \left| \mathrm{e}^{-\int_2^1 \mathrm{d}t\,\mathrm{d}t'\,\kappa(t)^*\eta(t-t')\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')}\kappa(t')} \right|^2$$
$$= \mathrm{e}^{-2\mathrm{Re}\int_2^1 \mathrm{d}t\,\mathrm{d}t'\,\cdots} \,. \tag{7.2.47}$$

指数部分の複素共役をとり，積分変数 t と t' を交換すると

$$\left[\int_2^1 \mathrm{d}t\,\mathrm{d}t'\,\cdots\right]^* = \int \mathrm{d}t\,\mathrm{d}t'\,\kappa(t)^*\eta(t'-t)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')}\kappa(t') \tag{7.2.48}$$

となり，式(7.2.47)の指数部分は次のようになる．

$$2\,\mathrm{Re}\left(\int_2^1 \mathrm{d}t\,\mathrm{d}t'\,\cdots\right) = \int \mathrm{d}t\,\mathrm{d}t'\,\kappa(t)^*\left[\eta(t-t')+\eta(t'-t)\right]\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')}\kappa(t') \,. \tag{7.2.49}$$

ここで

$$\eta(t-t')+\eta(t'-t) = \left\{ \begin{array}{ll} 1+0 & (t>t') \\ 0+1 & (t<t') \end{array} \right\} = 1 \tag{7.2.50}$$

であるので，指数部分は式(7.2.17)で定義された γ を使って

$$2\,\mathrm{Re}\left(\int_2^1 \mathrm{d}t\,\mathrm{d}t'\,\cdots\right) = \int \mathrm{d}t\,\mathrm{d}t'\,\kappa(t)^*\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t'}\kappa(t') = |\gamma|^2 \tag{7.2.51}$$

となり，確率は次のようになる．

$$p(0,0)^\kappa = \mathrm{e}^{-|\gamma|^2} \leq 1 \,. \tag{7.2.52}$$

次に $y''=0$，つまり $n=0$ の状態から出発して，時間 t_1 で状態 n に見出される確率 $p(n,0)^\kappa = \left|\langle n,t_1|0,t_2\rangle^\kappa\right|^2$ を求めよう．

$$\langle y^{\dagger\prime},t_1|0,t_2\rangle^\kappa = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}y^{\dagger\prime}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t_1}\gamma}\langle 0,t_1|0,t_2\rangle^\kappa = \sum_{n=0}^{\infty}\underbrace{\langle y^{\dagger\prime}|n\rangle}_{=(y^{\dagger\prime})^n/\sqrt{n!}}\langle n,t_1|0,t_2\rangle^\kappa \tag{7.2.53}$$

を使うと

$$\langle n,t_1|0,t_2\rangle^\kappa = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\omega t_1}\frac{(-\mathrm{i}\gamma)^n}{\sqrt{n!}}\langle 0,t_1|0,t_2\rangle^\kappa \tag{7.2.54}$$

となり，確率は以下のようになる．

$$p(n,0)^\kappa = \frac{\left(|\gamma|^2\right)^n}{n!}p(0,0)^\kappa = \frac{|\gamma|^{2n}}{n!}\,\mathrm{e}^{-|\gamma|^2} \,. \tag{7.2.55}$$

確かにこれは次の関係式を満たしている．

$$\sum_{n=0}^{\infty} p(n,0)^\kappa = \mathrm{e}^{|\gamma|^2}\,\mathrm{e}^{-|\gamma|^2} = 1 \,. \tag{7.2.56}$$

ここで $|\gamma|^2$ は以下のように n の平均値であり

$$\sum_{n=0}^{\infty} np(n,0)^{\kappa} = \langle n\rangle^{\kappa} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{|\gamma|^{2n}}{(n-1)!}\,\mathrm{e}^{-|\gamma|^2} = |\gamma|^2 \tag{7.2.57}$$

確率はポアソン分布となることにも注意しよう．

$$p(n,0)^{\kappa} = \frac{\left(\langle n\rangle^{\kappa}\right)^n}{n!}\,\mathrm{e}^{-\langle n\rangle^{\kappa}} . \tag{7.2.58}$$

さて，ここで一般的な場合に返って，式(7.2.16)を思い起こそう．

$$\begin{aligned}\langle y^{\dagger\prime}, t_1 | y'', t_2\rangle^{\kappa} &= \sum_{n,n'=0}^{\infty} \underbrace{\langle y^{\dagger\prime}|n\rangle}_{=(y^{\dagger\prime})^n/\sqrt{n!}} \times \langle n, t_1|n', t_2\rangle^{\kappa} \times \underbrace{\langle n'|y''\rangle}_{=(y'')^n/\sqrt{n!}} \\ &= \mathrm{e}^{y^{\dagger\prime}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t_1}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t_2} y''}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}y^{\dagger\prime}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t_1}\gamma}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\gamma^*\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t_2} y''}\langle 0, t_1|0, t_2\rangle^{\kappa} .\end{aligned} \tag{7.2.59}$$

まず最初に，新しい変数

$$y^{\dagger\prime} \to \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t_1}\mathrm{i}u\,, \qquad y'' \to \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t_2}\mathrm{i}v \tag{7.2.60}$$

を定義し，さらに初期状態と終状態のエネルギーに依存する時間依存性が明らかになるように

$$\langle n, t_1|n', t_2\rangle^{\kappa} = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\omega t_1}\langle n|n'\rangle^{\kappa}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}n'\omega t_2} \tag{7.2.61}$$

と書くと，前述の確率振幅 $\langle n|n'\rangle^{\kappa}$ を生成する関係式は以下のような簡単な形になる．

$$\mathrm{e}^{-uv+u\gamma+v\gamma^*} = \sum_{n,n'=0}^{\infty} \frac{u^n}{\sqrt{n!}}\mathrm{i}^{n+n'}\frac{\langle n|n'\rangle^{\kappa}}{\langle 0|0\rangle^{\kappa}}\frac{v^{n'}}{\sqrt{n'!}} . \tag{7.2.62}$$

ここで左辺は置き換え

$$u \to \frac{\gamma^*}{\gamma}v\,, \qquad v \to \frac{\gamma}{\gamma^*}u \tag{7.2.63}$$

で不変になるという対称性を持っていることに注意しよう．これより次の関係式が成り立つ．

$$\sum_{n,n'=0}^{\infty} \frac{u^n}{\sqrt{n!}}\mathrm{i}^{n+n'}\frac{\langle n|n'\rangle^{\kappa}}{\langle 0|0\rangle^{\kappa}}\frac{v^{n'}}{\sqrt{n'!}} = \sum_{n,n'=0}^{\infty} \frac{\left[(\gamma^*/\gamma)v\right]^{n'}}{\sqrt{n'!}}\mathrm{i}^{n+n'}\frac{\langle n'|n\rangle^{\kappa}}{\langle 0|0\rangle^{\kappa}}\frac{\left[(\gamma/\gamma^*)u\right]^{n}}{\sqrt{n!}} . \tag{7.2.64}$$

つまり次の式が成立し，

$$\langle n'|n\rangle^{\kappa} = (\gamma^*/\gamma)^{n-n'}\langle n|n'\rangle^{\kappa} \tag{7.2.65}$$

結果として確率は次の式を満たす．

$$p(n',n)^{\kappa} = \left|\langle n'|n\rangle^{\kappa}\right|^2 = p(n,n')^{\kappa} . \tag{7.2.66}$$

ここで式(7.2.62)に返り，左辺をテーラー展開して $v^{n'}/\sqrt{n'!}$ の項を取り出すと，

$$\mathrm{e}^{u\gamma}\frac{(\gamma^* - u)^{n'}}{\sqrt{n'!}} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{u^n}{\sqrt{n!}}\mathrm{i}^{n+n'}\frac{\langle n|n'\rangle^\kappa}{\langle 0|0\rangle^\kappa} \tag{7.2.67}$$

となる．これをさらに u のテーラー級数だと考えると

$$\mathrm{i}^{n+n'}\frac{\langle n|n'\rangle^\kappa}{\langle 0|0\rangle^\kappa} = \frac{1}{\sqrt{n!\,n'!}}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}u}\right)^n (\gamma^* - u)^{n'}\ \mathrm{e}^{u\gamma}\Big|_{u=0} \tag{7.2.68}$$

を得る．この式は $x = |\gamma|^2 - u\gamma$ とおくと，$u = 0$ が $x = |\gamma|^2$ に対応し，以下のように書ける．

$$\mathrm{i}^{n+n'}\frac{\langle n|n'\rangle^\kappa}{\langle 0|0\rangle^\kappa} = \frac{1}{\sqrt{n!\,n'!}}(-1)^n\gamma^{n-n'}\,\mathrm{e}^{|\gamma|^2}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^n x^{n'}\,\mathrm{e}^{-x}\Big|_{x=|\gamma|^2} . \tag{7.2.69}$$

ここで現れた式は以下のラゲール*の多項式である．ただし n は整数で，指数 α は任意とする．

$$\mathrm{L}_n^{(\alpha)}(x) = \frac{1}{n!}x^{-\alpha}\,\mathrm{e}^x\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^n x^{n+\alpha}\,\mathrm{e}^{-x} . \tag{7.2.70}$$

この式を使うと結果は以下のように書ける．

$$\begin{aligned}\frac{\langle n|n'\rangle^\kappa}{\langle 0|0\rangle^\kappa} &= \sqrt{\frac{n!}{n'!}}\,(-\mathrm{i}\gamma^*)^{n'-n}\,\mathrm{L}_n^{(n'-n)}\big(|\gamma|^2\big) \\ &= \sqrt{\frac{n'!}{n!}}\,(-\mathrm{i}\gamma)^{n-n'}\,\mathrm{L}_{n'}^{(n-n')}\big(|\gamma|^2\big) .\end{aligned} \tag{7.2.71}$$

これより，確率は n と n' の中で大きい方($n_>$)および小さい方($n_<$)を使って

$$p(n,n')^\kappa = \frac{n_<!}{n_>!}\big(|\gamma|^2\big)^{n_>-n_<}\left[\mathrm{L}_{n_<}^{(n_>-n_<)}\big(|\gamma|^2\big)\right]^2\mathrm{e}^{-|\gamma|^2} \tag{7.2.72}$$

のように書いておくと便利である．特に $n = n'$ の場合は以下のようになる．

$$p(n,n)^\kappa = \left[\mathrm{L}_n^{(0)}\big(|\gamma|^2\big)\right]^2\mathrm{e}^{-|\gamma|^2} . \tag{7.2.73}$$

ラゲールの多項式 $\mathrm{L}_n^{(\alpha)}(x)$ は以下のように書ける．

$$\begin{aligned}\mathrm{L}_n^{(\alpha)}(x) &= \frac{1}{n!}x^{-\alpha}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - 1\right)^n x^{n+\alpha} \\ &= \sum_{k=0}^{n}(-1)^k\frac{(n+\alpha)!}{(n-k)!\,(k+\alpha)!}\frac{x^k}{k!} .\end{aligned} \tag{7.2.74}$$

いくつかの例をあげておく．

$$\begin{aligned}\mathrm{L}_0^{(\alpha)} &= 1 , \\ \mathrm{L}_1^{(\alpha)} &= 1 + \alpha - x , \\ \mathrm{L}_2^{(\alpha)} &= \frac{1}{2}(1+\alpha)(2+\alpha) - (2+\alpha)x + \frac{1}{2}x^2 .\end{aligned} \tag{7.2.75}$$

*Edmond LAGUERRE (1834–1886)

また以下のような場合は，和が初項および末項のみで簡単な式となる．

$$\mathrm{L}_n^{(\alpha)}(0) = \frac{(n+\alpha)!}{n!\,\alpha!}\,, \qquad \mathrm{L}_n^{(-n)}(x) = \frac{(-x)^n}{n!}\,. \tag{7.2.76}$$

さて，次のような場合は特に簡単になる．

$$|\gamma|^2 \ll 1 \quad \text{および} \quad \Delta n = n - n' \neq 0\,. \tag{7.2.77}$$

この場合，主要項は $\left(|\gamma|^2\right)^{|\Delta n|}$ であり，確率は

$$\begin{aligned} p(n,n')^\kappa &\cong \frac{n_<!}{n_>!}\left[\mathrm{L}_{n_<}^{(n_>-n_<)}(0)\right]^2\left(|\gamma|^2\right)^{|\Delta n|} \\ &= \frac{n_>!}{n_<!}\frac{|\gamma|^{2|\Delta n|}}{\left(|\Delta n|!\right)^2} \qquad (\Delta n \neq 0) \end{aligned} \tag{7.2.78}$$

となる．例として $\Delta n = \pm 1$ および $\Delta n = \pm 2$ に対する確率は次の通りである．

$$\begin{aligned} p(n+1,n)^\kappa &\cong (n+1)|\gamma|^2\,, \\ p(n-1,n)^\kappa &\cong n|\gamma|^2\,, \\ p(n+2,n)^\kappa &\cong \frac{1}{4}(n+1)(n+2)|\gamma|^4\,, \\ p(n-2,n)^\kappa &\cong \frac{1}{4}n(n-1)|\gamma|^4\,. \end{aligned} \tag{7.2.79}$$

ここで $p(n-1,n) = p\big((n-1)+1, n-1\big)$ や $p(n-2,n) = p\big((n-2)+2, n-2\big)$ が式(7.2.66)より成立することに注意しよう．

$\Delta n = 0$ の場合の確率 $p(n,n)^\kappa$ については展開式

$$\mathrm{L}_n^{(0)}(x) = 1 - nx + \frac{1}{4}n(n-1)x^2 + \cdots \tag{7.2.80}$$

において 1 次の項まで必要となる．これを使って $|\gamma|^2 \ll 1$ の 1 次の項まで残すと

$$p(n,n)^\kappa \cong \left(1 - n|\gamma|^2\right)^2\left(1 - |\gamma|^2\right) \cong 1 - (2n+1)|\gamma|^2 \tag{7.2.81}$$

となり，1 次の項を含む部分の和は確かに次のようになっており，一貫性の基本的なチェックとなっている．

$$p(n,n)^\kappa + p(n-1,n)^\kappa + p(n+1,n)^\kappa = 1 + \left[\,|\gamma|^4 \text{ の項}\right]. \tag{7.2.82}$$

これらの $|\gamma|^2$ が小さいときの結果は，n とか n' がそれを補うほどには大きくないときにのみ成り立つ．つまり式(7.2.81)においては $(2n+1)|\gamma|^2 \ll 1$ を仮定しており，$n|\gamma|^2 \gtrsim 1$ の場合は正しくない．ここで式(7.2.67)に返り，書き直した次の式

$$\mathrm{e}^{u\gamma}\left(1 - \frac{\gamma^*}{u}\right)^{n'} = \sum_{n=0}^{\infty}\sqrt{\frac{n'!}{n!}}\,u^{n-n'}\mathrm{i}^{n-n'}\frac{\langle n|n'\rangle^\kappa}{\langle 0|0\rangle^\kappa} \tag{7.2.83}$$

を使って $|\gamma| \ll 1, n' \gg 1$ の領域について考察しよう．この場合，以下の近似が成り立つ．

$$\left(1 - \frac{\gamma^*}{u}\right)^{n'} = e^{n' \log(1 - \gamma^*/u)} \cong e^{-n'\gamma^*/u} . \tag{7.2.84}$$

そして，ここではさらに $|\Delta n| \ll n'$ の場合に注目しよう．このとき，たとえば近似式

$$\frac{n'!}{n!} = \frac{n'!}{(n' + \Delta n)!} \cong \frac{1}{(n')^{\Delta n}} \tag{7.2.85}$$

より

$$\sqrt{\frac{n'!}{n!}}\, u^{n-n'} \cong \left(\frac{u}{\sqrt{n'}}\right)^{\Delta n} \tag{7.2.86}$$

となる．この形および

$$\gamma = |\gamma|\, e^{i\alpha} , \tag{7.2.87}$$

より，新しい変数

$$\frac{u}{\sqrt{n'}} = e^{-i\alpha} t \tag{7.2.88}$$

を導入すると，次の関係式が得られる．

$$e^{\sqrt{n'}|\gamma|\,(t - \frac{1}{t})} = \sum_{\Delta n} t^{\Delta n}\, e^{-i\alpha\Delta n}\, i^{\Delta n}\, \frac{\langle n' + \Delta n | n' \rangle^\kappa}{\langle 0 | 0 \rangle^\kappa} . \tag{7.2.89}$$

ここで左辺は以下で示すように，ベッセル*の係数，つまり整数位のベッセル関数の母関数である．

$$e^{\frac{1}{2}z\,(t - \frac{1}{t})} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} t^m J_m(z) . \tag{7.2.90}$$

したがって，$\langle 0 | 0 \rangle^\kappa \cong 1$ となることを考慮すると

$$\langle n' + \Delta n | n' \rangle^\kappa \cong \left(-i\, e^{i\alpha}\right)^{\Delta n} J_{\Delta n}\left(2\sqrt{n'}|\gamma|\right) \tag{7.2.91}$$

となり，確率は以下のようになる．

$$p(n' + \Delta n, n')^\kappa \cong \left[J_{\Delta n}\left(2\sqrt{n'}|\gamma|\right)\right]^2 . \tag{7.2.92}$$

確率として適切かどうかのチェックのため，以下の関係式に注意しよう．まず式(7.2.90)で $t \to 1/t$ とすると

$$e^{-\frac{1}{2}z\,(t - \frac{1}{t})} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \frac{1}{t^m} J_m(z) \tag{7.2.93}$$

となるから，次の関係式が得られる．

$$1 = \sum_{m,m'=-\infty}^{\infty} t^{m-m'} J_m(z) J_{m'}(z) . \tag{7.2.94}$$

---

*Friedrich Wilhelm Bessel (1784–1846)

ここで t に依存しない項を取り出すと次の和則を得る．

$$1 = \sum_{m=-\infty}^{\infty} [\mathrm{J}_m(z)]^2 \ . \tag{7.2.95}$$

この関係式を使うと，求めた結果は確かに以下のように和が 1 となっている．

$$\sum_n p(n,n')^\kappa = \sum_{\Delta n=-\infty}^{\infty} \left[\mathrm{J}_{\Delta n}\left(2\sqrt{n'}|\gamma|\right)\right]^2 = 1 \ . \tag{7.2.96}$$

式(7.2.90)において，$t \to -t$ とすると

$$\mathrm{J}_m(z) = (-1)^m \mathrm{J}_{-m}(z) \tag{7.2.97}$$

となり，式(7.2.66)における $n' \gg 1$ の場合の近似式

$$p(n'+\Delta n, n')^\kappa \cong p(n'-\Delta n, n')^\kappa \tag{7.2.98}$$

を得る．

ベッセル関数 J_m の種々の性質については問題 7-11 および 7-12 で扱う．ここでは $n' \gg 1$ が古典的極限ではなく，$|\Delta n| \gg 1$ および $\sqrt{n'}|\gamma| \gg 1$ が必要であることに注意しておこう．さて，式(7.2.90)の母関数において $t = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}$ とおくと

$$\mathrm{e}^{\frac{1}{2}z\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi} - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}\right)} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}z\sin\phi} = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}m\phi}\mathrm{J}_m(z) \tag{7.2.99}$$

となり，次の積分表示が得られる．

$$\int_0^{2\pi} \frac{\mathrm{d}\phi}{2\pi}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}z\sin\phi}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}m\phi} = \mathrm{J}_m(z) \ . \tag{7.2.100}$$

この式を代入すると次の式を得る．

$$\left[\mathrm{J}_{\Delta n}\left(2\sqrt{n'}|\gamma|\right)\right]^2 = \int \frac{\mathrm{d}\phi}{2\pi}\frac{\mathrm{d}\phi'}{2\pi}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Delta n(\phi-\phi')}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}2\sqrt{n'}|\gamma|(\sin\phi - \sin\phi')} \ . \tag{7.2.101}$$

$|\Delta n| \gg 1$ および $\sqrt{n'}|\gamma| \gg 1$ の場合は，積分で重要な部分は $\phi' \cong \phi$ となる領域である．したがって $\phi' = \phi - \psi$ と書き，$\phi - \phi' = \psi$ および $|\psi| \ll 1$ の条件より近似式 $\sin\phi - \sin\phi' \cong \psi\cos\phi$ を使うと次のようになる．

$$p(n'+\Delta n, n')^\kappa \cong \frac{1}{(2\pi)^2}\int \mathrm{d}\phi\,\mathrm{d}\psi\; \mathrm{e}^{\mathrm{i}\psi\left[-\Delta n + 2\sqrt{n'}|\gamma|\cos\phi\right]} \ . \tag{7.2.102}$$

ここで ψ の積分を行うと

$$p(n'+\Delta n, n')^\kappa \cong \frac{1}{\pi}\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\phi\, \delta\left(2\sqrt{n'}|\gamma|\cos\phi - \Delta n\right) \tag{7.2.103}$$

となり，デルタ関数が出てくるから，ϕ の積分でゼロとならないのは $|\Delta n| < 2\sqrt{n'}|\gamma|$

の場合のみである．$x=\cos\phi$ とおいて積分すると次の結果を得る．

$$p(n'+\Delta n,n')^{\kappa} \cong \frac{2}{\pi}\int_{-1}^{1}\frac{\mathrm{d}x}{\sqrt{1-x^2}}\,\delta\left(2\sqrt{n'}|\gamma|x-\Delta n\right)$$
$$=\begin{cases} 0 & (|\Delta n|>2\sqrt{n'}|\gamma|)\,, \\ \dfrac{1}{\pi}\left[4n'|\gamma|^2-(\Delta n)^2\right]^{-\frac{1}{2}} & (|\Delta n|<2\sqrt{n'}|\gamma|)\,. \end{cases} \tag{7.2.104}$$

この式においても，ここでの近似と一貫していて，以下のように全確率は 1 となっている．

$$\sum_{\Delta n} p(n'+\Delta n,n')^{\kappa} \cong \sum_{\Delta n}\frac{1}{\pi}\frac{1}{\sqrt{4n'|\gamma|^2-(\Delta n)^2}}$$
$$\cong \frac{1}{\pi}\int_{-2\sqrt{n'}|\gamma|}^{2\sqrt{n'}|\gamma|}\frac{\mathrm{d}\nu}{\sqrt{4n'|\gamma|^2-\nu^2}}=1\,. \tag{7.2.105}$$

量子論的記述の極限として，より深く古典的記述を理解するためには問題 7-10 を解いて欲しい．

7.3 ラゲールの多項式についての注意

ここでラゲールの多項式 $\mathrm{L}_n^{(\alpha)}(x)$ の数学的な性質について少し述べておこう．まず次の関係式

$$\mathrm{L}_n^{(\alpha)}(x)=\frac{1}{n!}x^{-\alpha}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}-1\right)^n x^{\alpha+n}=\frac{1}{n!}x^{-\alpha}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}-1\right)^n x\,x^{\alpha-1+n}$$
$$=\frac{1}{n!}x^{-(\alpha-1)}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}-1\right)^n x^{\alpha-1+n}$$
$$+\frac{1}{(n-1)!}x^{-\alpha}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}-1\right)^{n-1}x^{\alpha+n-1} \tag{7.3.1}$$

つまり，n と α についての代数的な漸化式

$$\mathrm{L}_n^{(\alpha)}(x)=\mathrm{L}_n^{(\alpha-1)}(x)+\mathrm{L}_{n-1}^{(\alpha)}(x) \tag{7.3.2}$$

に注意しよう．また $\mathrm{L}_n^{(\alpha)}(x)$ を

$$\mathrm{L}_n^{(\alpha)}(x)=\frac{1}{n!}x^{-\alpha}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}-1\right)^n x^{\alpha}x^n=\frac{1}{n!}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}-1+\frac{\alpha}{x}\right)^n x^n \tag{7.3.3}$$

の形に書き換えると

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - 1 + \frac{\alpha}{x}\right) \mathrm{L}_n^{(\alpha)}(x) = \frac{x^{-1}}{n!} x \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - 1 + \frac{\alpha}{x}\right)^{n+1} x^{-1} x^{n+1}$$
$$= \frac{x^{-1}}{n!} \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - 1 + \frac{\alpha - 1}{x}\right)^{n+1} x^{n+1} \tag{7.3.4}$$

を得る．さらに前述の漸化式を使うと

$$\left(x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - x + \alpha\right) \mathrm{L}_n^{(\alpha)} = (n+1)\mathrm{L}_{n+1}^{(\alpha-1)} = (n+1)\left(\mathrm{L}_{n+1}^{(\alpha)} - \mathrm{L}_n^{(\alpha)}\right) \tag{7.3.5}$$

となり，以下の n についての微分形の漸化式が得られる．

$$\left(x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - x + n + 1 + \alpha\right) \mathrm{L}_n^{(\alpha)} = (n+1)\mathrm{L}_{n+1}^{(\alpha)} \,. \tag{7.3.6}$$

整数 α に対しては，次の等価な書き方より

$$\frac{n!}{(n+\alpha)!} (-x)^{\alpha} \mathrm{L}_n^{(\alpha)}(x) = \mathrm{L}_{n+\alpha}^{(-\alpha)}(x) = \frac{1}{(n+\alpha)!} x^{\alpha} \mathrm{e}^{x} \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^{n+\alpha} x^n \mathrm{e}^{-x} \tag{7.3.7}$$

次の関係式を得る．

$$\alpha \quad 整数: \qquad \mathrm{L}_n^{(\alpha)}(x) = \frac{(-1)^{\alpha}}{n!} \mathrm{e}^{x} \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^{n+\alpha} x^n \mathrm{e}^{-x}$$
$$= \frac{(-1)^{\alpha}}{n!} \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - 1\right)^{n+\alpha} x^n \,. \tag{7.3.8}$$

後者の式より α についての微分形の漸化式

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - 1\right) \mathrm{L}_n^{(\alpha)} = -\mathrm{L}_n^{(\alpha+1)} \tag{7.3.9}$$

が得られる．さらに式(7.3.2)を用いると漸化式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\mathrm{L}_n^{(\alpha)} = \mathrm{L}_n^{(\alpha)} - \mathrm{L}_n^{(\alpha+1)} = -\mathrm{L}_{n-1}^{(\alpha+1)} \tag{7.3.10}$$

が得られる．これは整数 α に対して証明したが，一般的に正しい関係式である．この最後の結果と，式(7.3.5)で $n \to n-1$ および $\alpha \to \alpha+1$ とおいた式

$$\left(x\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} - x + \alpha + 1\right) \mathrm{L}_{n-1}^{(\alpha+1)} = n\mathrm{L}_n^{(\alpha)} \tag{7.3.11}$$

を組み合わせると次のラゲールの方程式が得られる．

$$\left[x\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + (\alpha + 1 - x)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + n\right] \mathrm{L}_n^{(\alpha)} = 0 \,. \tag{7.3.12}$$

7.4　2次元振動子

ここでは2次元の振動子について考察しよう．ハミルトニアンは

$$H = \omega\left(\tfrac{1}{2}p_1^2 + \tfrac{1}{2}q_1^2\right) - \tfrac{1}{2}\omega + \omega\left(\tfrac{1}{2}p_2^2 + \tfrac{1}{2}q_2^2\right) - \tfrac{1}{2}\omega$$
$$= \omega\left(y_1^\dagger y_1 + y_2^\dagger y_2\right) \tag{7.4.1}$$

で与えられ，これは

$$\omega_1 = \omega_2 = \omega \tag{7.4.2}$$

という特別な場合で，この 2 次元振動子は等方的である．エネルギー固有値は明らかに

$$E_{n_1,n_2.} = n_1\omega + n_2\omega = N\omega \tag{7.4.3}$$

となり，ここで N は

$$N = n_1 + n_2 = 0, 1, \ldots \tag{7.4.4}$$

の値をとる．$N = 0$，つまり $n_1 = n_2 = 0$ の場合を除けば，これらの固有値は多重項であり，つまり縮退している．N に対して，$n_1 = N, n_2 = 0; n_1 = N-1, n_2 = 1; \ldots; n_1 = 0, n_2 = N$ があり，全体で $N+1$ 通りの可能性がある．つまりエネルギーが $N\omega$ のときは，多重度は

$$m(N) = N + 1 \tag{7.4.5}$$

となる．

これと密接に関連しているのは 2 次元の回転による変数変換である．

$$\overline{y}_1 = y_1\cos\alpha + y_2\sin\alpha\ , \qquad \overline{y}_1^\dagger = y_1^\dagger\cos\alpha + y_2^\dagger\sin\alpha\ ,$$
$$\overline{y}_2 = -y_1\sin\alpha + y_2\cos\alpha\ , \qquad \overline{y}_2^\dagger = -y_1^\dagger\sin\alpha + y_2^\dagger\cos\alpha\ . \tag{7.4.6}$$

交換関係は以下のように保たれ

$$\left[\overline{y}_k, \overline{y}_l\right] = \left[\overline{y}_k^\dagger, \overline{y}_l^\dagger\right] = 0 \quad \text{および} \quad \left[\overline{y}_k, \overline{y}_l^\dagger\right] = \delta_{kl} \quad (k, l = 1, 2) \tag{7.4.7}$$

そしてより基本的なこととしてラグランジアンが次のように同じ形をとることは簡単にチェックできるであろう．

$$L(y, y^\dagger) = \mathrm{i}\sum_k y_k^\dagger \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} y_k - \omega\sum_k y_k^\dagger y_k = \overline{L} = L(\overline{y}, \overline{y}^\dagger)\ . \tag{7.4.8}$$

2 次元での回転は変数

$$y_+ = \frac{1}{\sqrt{2}}(y_1 - \mathrm{i}y_2)\ , \qquad y_+^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(y_1^\dagger + \mathrm{i}y_2^\dagger)\ ,$$
$$y_- = \frac{1}{\sqrt{2}}(y_1 + \mathrm{i}y_2)\ , \qquad y_-^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}}(y_1^\dagger - \mathrm{i}y_2^\dagger) \tag{7.4.9}$$

を使うとより簡単に表現できる．もちろんこの変換でラグランジアンは次のように同じ形を保ち，

$$L = \mathrm{i}\sum_{\sigma=\pm} y_\sigma^\dagger \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} y_\sigma - \omega\sum_{\sigma=\pm} y_\sigma^\dagger y_\sigma \tag{7.4.10}$$

また交換関係もたとえば以下のように保たれる．

$$\begin{aligned}\left[y_+,y_+^\dagger\right] &= \tfrac{1}{2}\left[y_1-\mathrm{i}y_2,y_1^\dagger+\mathrm{i}y_2^\dagger\right] = \tfrac{1}{2}\left[y_1,y_1^\dagger\right]+\tfrac{1}{2}\left[y_2,y_2^\dagger\right]=1\,,\\ \left[y_+,y_-^\dagger\right] &= \tfrac{1}{2}\left[y_1-\mathrm{i}y_2,y_1^\dagger-\mathrm{i}y_2^\dagger\right] = \tfrac{1}{2}\left[y_1,y_1^\dagger\right]-\tfrac{1}{2}\left[y_2,y_2^\dagger\right]=0\,.\end{aligned} \tag{7.4.11}$$

この変数を使うと2次元での回転は

$$\begin{aligned}\overline{y}_+ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}y_+\,, \qquad & \overline{y}_+^\dagger &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}y_+^\dagger\,,\\ \overline{y}_- &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}y_-\,, \qquad & \overline{y}_-^\dagger &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}y_-^\dagger\end{aligned} \tag{7.4.12}$$

のように簡単に表され，以下のように交換関係が保たれていることは自明である．

$$\left[\overline{y}_+,\overline{y}_+^\dagger\right] = \left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\alpha}y_+,\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\alpha}y_+^\dagger\right] = \left[y_+,y_+^\dagger\right]=1\,. \tag{7.4.13}$$

ここで無限小回転

$$\overline{y}_\pm = y_\pm - \delta y_\pm = (1\pm\mathrm{i}\delta\alpha)y_\pm \tag{7.4.14}$$

について考えよう．無限小変化は

$$\delta y_\pm = \mp\mathrm{i}\delta\alpha\,y_\pm = \frac{1}{\mathrm{i}}\left[y_\pm,G\right] = \frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial G}{\partial y_\pm^\dagger} \tag{7.4.15}$$

のように書け，生成演算子は

$$G=\delta\alpha\,L_3 \quad \text{ただし} \quad L_3 = y_+^\dagger y_+ - y_-^\dagger y_- \tag{7.4.16}$$

となる．代わりにもとの変数で書くと次のようになり，

$$L_3 = y_+^\dagger y_+ - y_-^\dagger y_- = \mathrm{i}\left(y_1 y_2^\dagger - y_2 y_1^\dagger\right) = q_1p_2 - q_2p_1 \tag{7.4.17}$$

無限小変化は，たとえば以下のようになる．

$$\begin{aligned}\delta q_1 &= \frac{1}{\mathrm{i}}\left[q_1,\delta\alpha\,L_3\right] = -\delta\alpha\,q_2\,,\\ \delta q_2 &= \frac{1}{\mathrm{i}}\left[q_2,\delta\alpha\,L_3\right] = \delta\alpha\,q_1\,.\end{aligned} \tag{7.4.18}$$

明らかに，実際これらは2次元空間での無限小回転であり，L_3は3次元空間での軌道角運動量ベクトル$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{q}\times\boldsymbol{p}$の2次元での演算子(第3成分)であることがわかる．

変数として$y_{\sigma=\pm}$を使っても，もちろんエネルギーは$E_N=E_{n_+,n_-}=\omega(n_++n_-)$となり，多重度は$m(N)=N+1$である．しかし，同じ$N$に属する異なる状態は角運動量$L_3$の固有値$m$で区別される．

$$L_3{}'\equiv m = n_+-n_- = N-2n_- = N,N-2,\ldots,-N\,. \tag{7.4.19}$$

たとえば以下の例でわかるように，状態数の数も正しく表される．

$$
\begin{aligned}
N=1\ :&\qquad m=1,-1 &&\big[m(N)=N+1=2\big]\,,\\
N=2\ :&\qquad m=2,0,-2 &&\big[m(N)=N+1=3\big]\,,\\
N=3\ :&\qquad m=3,1,-1,-3 &&\big[m(N)=N+1=4\big]\,.
\end{aligned}
\tag{7.4.20}
$$

そこで質問である．定まったエネルギーと角運動量を持つ状態の q 表示の波動関数は何だろうか？ もちろん 1 次元での波動関数は

$$
\langle q|n\rangle=\pi^{-\frac14}\frac{1}{\sqrt{2^n n!}}\mathrm{H}_n(q)\,\mathrm{e}^{-\frac12 q^2}
\tag{7.4.21}
$$

で与えられることはすでにわかっており，2 次元では

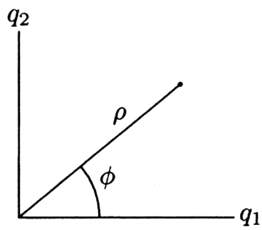
$$
\begin{aligned}
\langle q_1,q_2|n_1,n_2\rangle&=\langle q_1|n_1\rangle\langle q_2|n_2\rangle\\
&=\pi^{-\frac12}\frac{1}{\sqrt{2^{n_1}n_1!\,2^{n_2}n_2!}}\mathrm{H}_{n_1}(q_1)\mathrm{H}_{n_2}(q_2)\,\mathrm{e}^{-\frac12(q_1^2+q_2^2)}
\end{aligned}
\tag{7.4.22}
$$

となる．しかしこれは定まったエネルギー $E_N=\omega(n_1+n_2)$ を持つが角運動量 L_3 が定まった値を持つ状態ではない．そこで 1 次元の場合の式(7.1.25)の母関数に返ってみると，2 次元の場合は以下のようになる（ただしベクトル中の $'$ は略す）．

$$
\langle q_1,q_2|y_1,y_2\rangle=\pi^{-\frac12}\,\mathrm{e}^{-\frac12(q_1^2+q_2^2)+\sqrt2(q_1y_1+q_2y_2)-\frac12(y_1^2+y_2^2)}\,.
\tag{7.4.23}
$$

ここで式を $y_\pm$（$'$ が略してあるが数値である）で書き，さらに次の極座標を導入しよう．

$$
\begin{aligned}
q_1&=\rho\cos\phi\,,\\
q_2&=\rho\sin\phi\,,\\
q_1\pm\mathrm{i}q_2&=\rho\,\mathrm{e}^{\pm\mathrm{i}\phi}\,.
\end{aligned}
\tag{7.4.24}
$$



すると

$$
\begin{aligned}
&q_1^2+q_2^2=\rho^2\,,\qquad \tfrac12\big(y_1^2+y_2^2\big)=y_+y_-\,,\\
&\sqrt2\big(q_1y_1+q_2y_2\big)=\rho\big(y_+\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}+y_-\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}\big)
\end{aligned}
\tag{7.4.25}
$$

となり

$$
\begin{aligned}
\langle\rho,\phi|y_+,y_-\rangle&=\pi^{-\frac12}\,\mathrm{e}^{-y_+y_-+\rho(y_+\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}+y_-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi})}\,\mathrm{e}^{-\frac12\rho^2}\\
&=\sum_{n_+,n_-=0}^{\infty}\psi_{n_+,n_-}(\rho,\phi)\,\frac{y_+^{n_+}}{\sqrt{n_+!}}\,\frac{y_-^{n_-}}{\sqrt{n_-!}}
\end{aligned}
\tag{7.4.26}
$$

となる．

さてここで式(7.2.62)と(7.2.71)で示した次の式を思い出そう．

$$\mathrm{e}^{-uv+u\gamma+v\gamma^*}=\sum_{n,n'=0}^{\infty}\frac{u^n}{\sqrt{n!}}\frac{v^{n'}}{\sqrt{n'!}}\mathrm{i}^{n+n'}\sqrt{\frac{n'!}{n!}}(-\mathrm{i}\gamma)^{n-n'}\mathrm{L}_{n'}^{(n-n')}\left(|\gamma|^2\right)\,. \tag{7.4.27}$$

これはラゲールの多項式の母関数である．ここで

$$\begin{aligned} &y_+\to u\,,\qquad y_-\to v\,,\qquad \gamma\to\rho\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\,,\\ &n\to n_+=\frac{N+m}{2}\,,\qquad n'\to n_-=\frac{N-m}{2} \end{aligned} \tag{7.4.28}$$

を代入すると波動関数

$$\begin{aligned}\psi_{N,m}(\rho,\phi)&=\frac{1}{\sqrt{\pi}}(-1)^{\frac{N-m}{2}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\phi}\sqrt{\frac{(\frac{N-m}{2})!}{(\frac{N+m}{2})!}}\rho^m\mathrm{L}_{\frac{1}{2}(N-m)}^{(m)}(\rho^2)\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\rho^2}\\&=\frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\phi}P_{N,m}(\rho)\end{aligned} \tag{7.4.29}$$

が得られる．これはよく知られた角度部分の波動関数 $(2\pi)^{-\frac{1}{2}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\phi}$ に，次の式の動径部分の波動関数を掛けた形になっている．

$$\begin{aligned}P_{N,m}(\rho)&=P_{N,-m}(\rho)\\&=(-1)^{\frac{N-|m|}{2}}\sqrt{2\frac{(\frac{N-|m|}{2})!}{(\frac{N+|m|}{2})!}}\rho^{|m|}\mathrm{L}_{\frac{1}{2}(N-|m|)}^{(|m|)}(\rho^2)\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\rho^2}\,.\end{aligned} \tag{7.4.30}$$

これらの波動関数はもちろん完全正規直交系を成している．極座標で表すと，面積要素は

$$\mathrm{d}q_1\,\mathrm{d}q_2=\mathrm{d}\rho\,\rho\,\mathrm{d}\phi \tag{7.4.31}$$

のように書け，直交性は

$$\begin{aligned}\delta_{NN'}\delta_{mm'}&=\int\mathrm{d}\rho\rho\,\mathrm{d}\phi\,\psi_{N,m}(\rho,\phi)^*\psi_{N',m'}(\rho,\phi)\\&=\int_0^\infty\mathrm{d}\rho\rho\,P_{N,m}(\rho)P_{N',m'}(\rho)\underbrace{\int_0^{2\pi}\frac{\mathrm{d}\phi}{2\pi}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(m'-m)\phi}}_{=\delta_{mm'}}\end{aligned} \tag{7.4.32}$$

の形をとり，これより動径部分の直交性は以下のようになる．

$$\int_0^\infty\mathrm{d}\rho\,\rho\,P_{N,m}(\rho)P_{N',m}(\rho)=\delta_{NN'}\,. \tag{7.4.33}$$

これらをラゲールの多項式の性質として最も簡単に表現するためには，以下の量子数（n_ρ は動径量子数）

$$N=|m|+2n_\rho\,,\qquad n_\rho=0,1,\ldots \tag{7.4.34}$$

を使って書き，変数を

$$\rho^2=x\,,\qquad |m|=\alpha=0,1,\ldots \tag{7.4.35}$$

とすると，以下のラゲールの多項式の形で直交性を表すことができる．ただし $n_\rho \to n$ とした．

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x\, x^\alpha\, \mathrm{e}^{-x} \mathrm{L}_n^{(\alpha)}(x) \mathrm{L}_{n'}^{(\alpha)}(x) = \delta_{nn'} \frac{(n+\alpha)!}{n!}\,. \tag{7.4.36}$$

このラゲールの多項式についての直交性は任意の α について成立する．最も簡単な例は $n = n' = 0$ の場合である．

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x\, x^\alpha\, \mathrm{e}^{-x} = \alpha!\,. \tag{7.4.37}$$

これはオイラーの有名な階乗関数の積分表示である．

ここで解いたシュレーディンガー方程式の形はどんなものだったのだろうか？ハミルトニアンは式(7.4.1)であり，エネルギー $E = \omega(|m| + 2n_\rho)$ に対して，波動関数 $\psi(q_1, q_2)$ は次の微分方程式にしたがう．

$$\left[|m| + 2n_\rho + 1 + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial^2}{\partial q_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial q_2^2}\right) - \frac{1}{2}\left(q_1^2 + q_2^2\right)\right]\psi = 0\,. \tag{7.4.38}$$

しかし，求めた波動関数に対しては，方程式は直交座標より極座標で書かれていた方が適当である．

そのためには，2次元および3次元空間でのラプラスの微分演算子，つまりラプラシアンを曲線座標表示で表すということが問題となる．3次元の座標 u_1, u_2, u_3 について考えよう．これは位置ベクトル $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}(u_1, u_2, u_3)$ を表す変数である．すると座標の無限小変化は

$$\begin{aligned} \mathrm{d}\boldsymbol{r} &= \mathrm{d}u_1 \frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial u_1} + \mathrm{d}u_2 \frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial u_2} + \mathrm{d}u_3 \frac{\partial \boldsymbol{r}}{\partial u_3} \\ &= \mathrm{d}u_1\, h_1 \boldsymbol{e}_1 + \mathrm{d}u_2\, h_2 \boldsymbol{e}_2 + \mathrm{d}u_3\, h_3 \boldsymbol{e}_3 \end{aligned} \tag{7.4.39}$$

と書け，この関係式で単位ベクトル $\boldsymbol{e}_k\,(k = 1, 2, 3)$（これは位置によって変化する）および正の計量関数 $h_k(u_1, u_2, u_3)\,(k = 1, 2, 3)$ が定義される．そして座標系は直交系で，かつ右手系であるとすると

$$\boldsymbol{e}_j \cdot \boldsymbol{e}_k = \delta_{jk} \qquad (j, k = 1, 2, 3) \quad \text{および} \quad \boldsymbol{e}_1 \times \boldsymbol{e}_2 = \boldsymbol{e}_3 \tag{7.4.40}$$

となり，隣り合う点の距離，つまり線素の2乗は

$$\mathrm{d}s^2 = \mathrm{d}x^2 + \mathrm{d}y^2 + \mathrm{d}z^2 = h_1^2 \mathrm{d}u_1^2 + h_2^2 \mathrm{d}u_2^2 + h_3^2 \mathrm{d}u_3^2 \tag{7.4.41}$$

となる．そして体積要素は

$$(\mathrm{d}\boldsymbol{r}) = \mathrm{d}x\, \mathrm{d}y\, \mathrm{d}z = \underbrace{h_1 h_2 h_3}_{\equiv h} \mathrm{d}u_1\, \mathrm{d}u_2\, \mathrm{d}u_3 \tag{7.4.42}$$

となり，関数 $\psi(\boldsymbol{r}) = \psi(u_1, u_2, u_3)$ の勾配は次のようになる．

$$\boldsymbol{\nabla}\psi = \left(\boldsymbol{e_1} \frac{1}{h_1} \frac{\partial}{\partial u_1} + \boldsymbol{e_2} \frac{1}{h_2} \frac{\partial}{\partial u_2} + \boldsymbol{e_3} \frac{1}{h_3} \frac{\partial}{\partial u_3}\right)\psi\,. \tag{7.4.43}$$

次に $\nabla^2\psi$ の形を見出すために，グリーンの定理

$$\int_V (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\nabla\cdot\nabla\psi = \int_S \mathrm{d}\boldsymbol{S}\cdot\nabla\psi \tag{7.4.44}$$

を使おう．これはベクトル $\nabla\psi$ の発散の体積 V での体積積分と，体積 V の境界 S 上のベクトル場の表面積分を結び付ける関係式である．u_1 が一定の微小な表面，u_2 が一定の微小な表面および u_3 が一定の微小な表面で囲まれる微小な空間をとり，上記の定理を適用するとラプラシアンは以下のようになることがわかる．

$$\nabla^2\psi = \frac{1}{h}\left[\frac{\partial}{\partial u_1}\underbrace{\frac{h}{h_1^2}}_{=h_2h_3/h_1}\frac{\partial}{\partial u_1} + \frac{\partial}{\partial u_2}\frac{h}{h_2^2}\frac{\partial}{\partial u_2} + \frac{\partial}{\partial u_3}\frac{h}{h_3^2}\frac{\partial}{\partial u_3}\right]\psi\,. \tag{7.4.45}$$

またこれより2次元の場合の形も明らかであろう．

たとえば，2次元の極座標 ρ, ϕ に対しては

$$h_\rho = 1\,,\quad h_\phi = \rho\,,\quad h = \rho\,,\qquad \mathrm{d}s^2 = \mathrm{d}\rho^2 + \rho^2\mathrm{d}\phi^2 \tag{7.4.46}$$

となるので

$$\begin{aligned}\nabla^2 = \frac{1}{\rho}\left[\frac{\partial}{\partial\rho}\rho\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{\partial}{\partial\phi}\frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\phi}\right] &= \frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho} + \frac{1}{\rho^2}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\\ &= \frac{1}{\rho^2}\left[\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right)^2 + \left(\frac{\partial}{\partial\phi}\right)^2\right]\end{aligned} \tag{7.4.47}$$

となる．そこで波動関数が

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\phi}P_{N,m}(\rho)\,,\qquad \frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\psi = -m^2\psi \tag{7.4.48}$$

の形であるから，$N = |m| + 2n_\rho$ として，微分方程式は

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2} + \frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho} - \frac{m^2}{\rho^2} + 2|m| + 4n_\rho + 2 - \rho^2\right]P(\rho) = 0 \tag{7.4.49}$$

となる．ここで $|m|$ は変数 ϕ と切り離された定数であり，n_ρ はゼロまたは正の整数である．

この微分方程式より，波動関数の一般的な性質が示唆される．まず ρ が大きいときは式(7.4.49)での主要項は

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2} - \rho^2\right)P \cong 0 \tag{7.4.50}$$

である．これより物理的に適切な解の漸近形は

$$P(\rho) \propto \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\rho^2} \tag{7.4.51}$$

となり，この解は以下の関係式を満たす．

$$\frac{\mathrm{d}P}{\mathrm{d}\rho} = -\rho P\,,\qquad \frac{\mathrm{d}^2P}{\mathrm{d}\rho^2} = (\rho^2 - 1)P \cong \rho^2 P\,. \tag{7.4.52}$$

近距離においては主要項は以下のようになり

$$\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}+\frac{1}{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}-\frac{m^2}{\rho^2}\right)P\cong 0 \tag{7.4.53}$$

解は次のように書ける．

$$P(\rho)\propto\rho^{\pm m}\qquad\left[ここで\ P\propto\rho^{|m|}\ が有界\right]. \tag{7.4.54}$$

これは以下のようにして示すことができる．

$$\left(\rho^2\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}+\rho\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\right)\rho^{\pm m}=\left(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\right)^2\rho^{\pm m}=(\pm m)^2\rho^{\pm m}\,. \tag{7.4.55}$$

以上より解を

$$P(\rho)\propto\rho^{|m|}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\rho^2}\mathrm{L}(\rho^2) \tag{7.4.56}$$

の形で書くと，$\mathrm{L}(x=\rho^2)$ に対する微分方程式が得られ，これはラゲールの方程式(7.3.12)となる．

さて，次に1階の微分を除いた微分方程式の形に注目してみよう．そのためには恒等式

$$\begin{aligned}\rho^{-a}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}\rho^a&=\left(\rho^{-a}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\rho^a\right)^2=\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\frac{a}{\rho}\right)^2\\&=\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}+\frac{2a}{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\frac{a^2-a}{\rho^2}\end{aligned} \tag{7.4.57}$$

または

$$\rho^a\left(\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}+\frac{2a}{\rho}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}+\frac{a^2-a}{\rho^2}\right)\rho^{-a}=\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2} \tag{7.4.58}$$

が役に立つ．ここで $a=\frac{1}{2}$ として，式(7.4.49)で

$$P(\rho)=\frac{1}{\sqrt{\rho}}u(\rho) \tag{7.4.59}$$

とすると

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}-\frac{m^2-\frac{1}{4}}{\rho^2}+2|m|+4n_\rho+2-\rho^2\right]u(\rho)=0 \tag{7.4.60}$$

を得る．すると式(7.4.33)の関係式は直交関係式

$$\int_0^\infty\mathrm{d}\rho\,u_{|m|,n_\rho}(\rho)u_{|m|,n'_\rho}(\rho)=\delta_{n_\rho n'_\rho} \tag{7.4.61}$$

となり，動径部分の波動関数は以下で与えられる．

$$u_{|m|,n_\rho}(\rho)=(-1)^{n_\rho}\sqrt{2\frac{n_\rho!}{(n_\rho+|m|)!}}\rho^{|m|+\frac{1}{2}}\mathrm{L}_{n_\rho}^{(|m|)}(\rho^2)\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\rho^2}\,. \tag{7.4.62}$$

7.5　3 次元振動子

3 次元空間での等方的な振動子はどうなるだろうか？ そのハミルトニアンは次の式で与えられる．

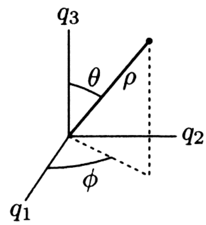
$$H=\sum_{k=1}^{3}\omega\frac{1}{2}(p_k^2+q_k^2-1)=\omega\frac{1}{2}(\boldsymbol{p}^2+\boldsymbol{q}^2)-\frac{3}{2}\omega\,. \tag{7.5.1}$$

今回は，目先を変えてシュレーディンガー方程式

$$\left(\frac{E}{\omega}+\frac{1}{2}\boldsymbol{\nabla}^2-\frac{1}{2}\boldsymbol{q}^2+\frac{3}{2}\right)\psi(\boldsymbol{q})=0 \tag{7.5.2}$$

から出発してみよう．方程式が 3 次元空間での回転で不変であることを利用するために，適切な方法として極座標

$$q_1=\rho\sin\theta\,\cos\phi\,,\quad q_2=\rho\sin\theta\,\sin\phi\,,\quad q_3=\rho\cos\theta \tag{7.5.3}$$



を導入すると

$$h_\rho=1\,,\ h_\theta=\rho\,,\ h_\phi=\rho\sin\theta\,,\quad h=\rho^2\sin\theta \tag{7.5.4}$$

となり，線素および体積要素は

$$\begin{aligned}\mathrm{d}s^2&=\mathrm{d}\rho^2+\rho^2\mathrm{d}\theta^2+\rho^2\sin^2\theta\mathrm{d}\phi^2\,,\\(\mathrm{d}\boldsymbol{q})&=\mathrm{d}q_1\,\mathrm{d}q_2\,\mathrm{d}q_3=\mathrm{d}\rho\,\rho^2\,\mathrm{d}\theta\,\sin\theta\,\mathrm{d}\phi\end{aligned} \tag{7.5.5}$$

となる．そしてラプラシアンは以下のように書ける．

$$\begin{aligned}-\boldsymbol{p}^2\to\boldsymbol{\nabla}^2&=\frac{1}{\rho^2\sin\theta}\left[\frac{\partial}{\partial\rho}\rho^2\sin\theta\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{\partial}{\partial\theta}\frac{\rho^2\sin\theta}{\rho^2}\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{\partial}{\partial\phi}\frac{\rho^2\sin\theta}{\rho^2\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right]\\&=\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}+\frac{1}{\rho^2}\left[\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}+\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\right]\,.\end{aligned} \tag{7.5.6}$$

さて，ここで 3 次元の角運動量を問題にしなければならないことは明らかである．角運動量の微分演算子を使った表現は

$$\boldsymbol{L}=\boldsymbol{q}\times\boldsymbol{p}\to\boldsymbol{q}\times\frac{1}{\mathrm{i}}\boldsymbol{\nabla}=-\frac{1}{\mathrm{i}}\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{q} \tag{7.5.7}$$

となり（ダッシュは省略した），

$$\begin{aligned}\boldsymbol{L}^2 &\to -(\boldsymbol{q}\times\boldsymbol{\nabla})\times(\boldsymbol{q}\times\boldsymbol{\nabla}) = \boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{q}\times\boldsymbol{\nabla}\\ &= \boldsymbol{\nabla}\cdot\big[\boldsymbol{q}\times(\boldsymbol{q}\times\boldsymbol{\nabla})\big] = \boldsymbol{\nabla}\cdot(\boldsymbol{q}\,\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{\nabla}-\boldsymbol{q}^2\boldsymbol{\nabla})\\ &= (\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{\nabla}+3)\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{\nabla}-\rho^2\boldsymbol{\nabla}^2-2\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{\nabla}\end{aligned} \tag{7.5.8}$$

となる．または $\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{\nabla}=\rho\dfrac{\partial}{\partial\rho}$ を使って書き直すと

$$\boldsymbol{L}^2 \to \Big(\rho\frac{\partial}{\partial\rho}\Big)^2+\rho\frac{\partial}{\partial\rho}-\rho^2\boldsymbol{\nabla}^2 = \rho^2\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+2\rho\frac{\partial}{\partial\rho}-\rho^2\boldsymbol{\nabla}^2 \tag{7.5.9}$$

となり，以下の結果を得る．

$$-\boldsymbol{p}^2+\frac{\boldsymbol{L}^2}{\rho^2}\to\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\,. \tag{7.5.10}$$

これより式(7.5.6)での $(-\rho^2\times)\boldsymbol{\nabla}^2$ の項のうち，角度に関する微分の項は，$\boldsymbol{L}^2$ の微分を使った表現であることがわかる．そこで簡単に

$$\big(\boldsymbol{L}^2\big)_{\mathrm{diff}} = -\frac{1}{\sin\theta}\frac{\partial}{\partial\theta}\sin\theta\frac{\partial}{\partial\theta}-\frac{1}{\sin^2\theta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} \tag{7.5.11}$$

と書き，また同様にして

$$\big(L_3\big)_{\mathrm{diff}} = \frac{1}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial\phi} \tag{7.5.12}$$

と書く．

さて，3.7 章において，調和関数 $\rho^l Y_{lm}(\theta,\phi)$ についてすでに議論した．これはラプラス方程式 $\boldsymbol{\nabla}^2(\rho^l Y_{lm})=0$ を満たす．ところが

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial\rho^2}+\frac{2}{\rho}\frac{\partial}{\partial\rho}\right)\rho^l Y_{lm} = l(l+1)\frac{\rho^l Y_{lm}}{\rho^2} \tag{7.5.13}$$

だから

$$\big(\boldsymbol{L}^2\big)_{\mathrm{diff}}Y_{lm} = l(l+1)Y_{lm} \qquad \Big[\text{ここでもちろん } \big(L_3\big)_{\mathrm{diff}}Y_{lm} = mY_{lm}\Big] \tag{7.5.14}$$

となる．つまり球面調和関数 $Y_{lm}(\theta,\phi)$ は，軌道角運動量が l（これが整数であることはすでに示した）の波動関数である．したがって全体の波動関数を

$$\psi(\rho,\theta,\phi) = \frac{1}{\rho}u(\rho)Y_{lm}(\theta,\phi) \tag{7.5.15}$$

のように書くと（式(7.4.58)より，ここでは $a=1$ とする），動径部分の微分方程式は次のようになる．

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}-\frac{l(l+1)}{\rho^2}+\frac{2E}{\omega}+3-\rho^2\right]u(\rho)=0\,. \tag{7.5.16}$$

これはまさに式(7.4.60)の 2 次元の場合の方程式と，以下のように対応させると

$$\begin{array}{cc} \underline{\text{2 次元振動子}} & \underline{\text{3 次元振動子}} \\ |m| & l+\frac{1}{2} \\ 2|m|+4n_\rho & 2E/\omega+1 \end{array} \tag{7.5.17}$$

同じ形をしており，$|m| \to l+\frac{1}{2}$ とすると

$$\frac{2E}{\omega}+1 = 2\left(l+\tfrac{1}{2}\right)+4n_\rho \tag{7.5.18}$$

となり，エネルギーは次の式で与えられる．

$$E = N\omega \quad \text{ただし} \quad N = l+2n_\rho = 0,1,\dots\ . \tag{7.5.19}$$

この状態は $N=0$（このときは $l=n_\rho=0$）を除いて一般に縮退している．そして縮退度は $m(N)=\frac{1}{2}(N+1)(N+2)$ となる．これは以下のようにして示すことができる．N が偶数の場合は

$$\begin{aligned} m(N) &= \sum_{l=0,2,\dots}^{N}\ \sum_{m=-l}^{l} = \sum_{l=0,2,\dots}^{N}(2l+1) \\ &= \underbrace{\frac{N+2}{2}}_{\text{項数}} \times \underbrace{(N+1)}_{\text{平均}} = \frac{1}{2}(N+1)(N+2) \end{aligned} \tag{7.5.20}$$

となり，また奇数の N については次のようになる．

$$m(N) = \sum_{l=1,3,\dots}^{N}(2l+1) = \underbrace{\frac{N+1}{2}}_{\text{項数}} \times \underbrace{(N+2)}_{\text{平均}} = \frac{1}{2}(N+1)(N+2)\ . \tag{7.5.21}$$

同じ関係式を次の式から導くこともできる（問題 2-34 を参照）．

$$\frac{E}{\omega} = N = n_1+n_2+n_3\ . \tag{7.5.22}$$

式(7.5.5)の $(\mathrm{d}\boldsymbol{q})$ を使うと，波動関数の直交性は

$$\int(\mathrm{d}\boldsymbol{q})\,\psi_{n_\rho lm}(\boldsymbol{q})^*\psi_{n_\rho lm}(\boldsymbol{q}) = \delta_{n_\rho n'_\rho}\delta_{ll'}\delta_{mm'} \tag{7.5.23}$$

と書ける．ここで波動関数を次のように書くと

$$\psi_{n_\rho lm}(\boldsymbol{q}) = \frac{1}{\rho}u_{n_\rho l}(\rho)Y_{lm}(\theta,\phi) \tag{7.5.24}$$

式(3.7.45)での球面調和関数の直交関係より，動径部分の波動関数の直交性は

$$\int_0^\infty \mathrm{d}\rho\, u_{n_\rho l}(\rho)u_{n'_\rho l}(\rho) = \delta_{n_\rho n'_\rho} \tag{7.5.25}$$

となる．この関係式は 2 次元 →3 次元への対応で作られたことから，以下のようにと

れば自動的に満たされている．

$$u_{n_\rho l}(\rho) = (-1)^{n_\rho}\sqrt{2\frac{n_\rho!}{(n_\rho+l+\frac{1}{2})!}}\rho^{l+1}\mathrm{L}_{n_\rho}^{(l+\frac{1}{2})}(\rho)\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\rho^2}\ . \tag{7.5.26}$$

実際，$n_\rho = 0$ の単純な場合は規格化されていることを以下のようにして簡単に確かめることができる．

$$\begin{aligned}\int_0^\infty \mathrm{d}\rho\,(u_{0l})^2 &= \frac{2}{(l+\frac{1}{2})!}\int_0^\infty \mathrm{d}\rho\,\rho\,(\rho^2)^{(l+\frac{1}{2})}\,\mathrm{e}^{-\rho^2}\\ &= \frac{1}{(l+\frac{1}{2})!}\int_0^\infty \mathrm{d}x\,x^{(l+\frac{1}{2})}\,\mathrm{e}^{-x} = 1\ .\end{aligned} \tag{7.5.27}$$

問題

7-1　式(7.1.4)のラグランジアンについて：次の作用演算子に必要な残りの項を求めよ．

$$W_{12} = \int_2^1 \left[\mathrm{i}y^\dagger\mathrm{d}y - H(y,y^\dagger,t)\mathrm{d}t\right] + (?)\ .$$

ただし作用は $\langle y^{\dagger\prime},t_1|y'',t_2\rangle$ に対して作用原理を適用したときに要求される次のものである．

$$\delta W_{12} = \left(G_{y^\dagger}+G_t\right)_1 - \left(G_y+G_t\right)_2\ .$$

（ヒント：問題 5-11）．

7-2　無次元化した形で $H=\frac{1}{2}p^2$, $[q,p]=\mathrm{i}$ とする：$\langle q',t|y''\rangle$ を求めよ．初期状態 $\langle q'|y''\rangle$ より，時間発展を考慮すればよい．規格化された不確定性最小状態は $y''=(q''+\mathrm{i}p'')/\sqrt{2}$ として，次のようになることを思い出そう．

$$|q'',p''\rangle = |y''\rangle\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|y''|^2}\ .$$

$\langle q',t|q'',p''\rangle$ について調べよ．そして確率密度 $|\langle q',t|q'',p''\rangle|^2$ を求めよ．これが q' に関して規格化されていることを示し，物理的な意味を述べよ．また式(5.4.25)の $\psi_\delta(x,t)$ との関係について調べよ．

7-3　式(7.1.25)の振動子の波動関数 $\psi_n(q)$ の母関数について考えよう．まず次の式を示せ．

$$\psi_n(q) = \sqrt{n!}\,t^{-n}\int\frac{\mathrm{d}\phi}{2\pi}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}n\phi}\langle q|y\rangle\Big|_{y\,=\,t\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}}\quad ただし\ t>0\ .$$

この関係式より ϕ についての積分に対して，停留位相法を使うことができるようになる．これより $\psi_n(q)$ は $q^2>2n$ に対しては指数関数的に小さくなることを示せ．また

$q^2 < 2n$ に対する近似式を求めよ．非常に大きい n の極限で，以下の半古典的近似の形になるか？

$$|\psi_n(q)|^2 \cong \begin{cases} \left(\pi\sqrt{2n-q^2}\right)^{-1} & (q^2 < 2n)\,, \\ 0 & (q^2 > 2n)\,. \end{cases}$$

7-4　外力の働く調和振動子: 外力 $\kappa(t)$ が以下のようにゆっくりと加えられゆっくりと切られるか，

$$\kappa(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Omega t}\,\mathrm{e}^{-(t/\tau)^2}$$

または次のように突然加えられ突然切られる．

$$\kappa(t) = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Omega t}\eta\left(\tfrac{1}{2}\tau - |t|\right)\,.$$

これら両方の場合について式(7.2.17)の γ を求めよ．またこれら2通りの $|\gamma|^2$ に関して，以下の場合について，$\Omega-\omega$ の関数としての概略図を使って比較せよ．

$$|\Omega-\omega| \cong \frac{1}{\tau}\,, \qquad \omega \gg \frac{1}{\tau}\,.$$

このような状況において，複素数の $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\Omega t}$ を実数の $2\cos(\Omega t)$ で置き換えるとどのような変化があるか？

7-5a　無次元変数で書かれたハミルトニアン

$$H = \omega\tfrac{1}{2}(p^2+q^2) - fq$$

は，一定の大きさの外力が働く調和振動子の系を記述する．エネルギー固有値を求め，q を変数とする波動関数を摂動のない場合($f=0$)の調和振動子の波動関数で表せ．同様に p を変数とする波動関数についての関係も求めよ．

7-5b　摂動項がある場合($f \neq 0$)の基底状態の q 表示の波動関数を求めよ．そして摂動のない場合の調和振動子の波動関数の母関数 $\langle q'|y'\rangle$ を適用して次の問いに答えよ．系が $f \neq 0$ の基底状態にある場合，$\omega\frac{1}{2}(p^2+q^2)$ を測定して $n\omega$ となる確率はいくらか？

7-6　無次元の変数で書かれた Ω を実の定数とする次のハミルトニアンがある．

$$H = \omega y^\dagger y + \frac{1}{2}\Omega\left(y^2 + y^{\dagger 2}\right)\,.$$

Ω が小さいとき，摂動論を適用してエネルギー変化の主要項を求めよ．正確なエネルギー固有値を求めることができるか(ヒント：q と p を導入する)？

7-7　問題7-5aのハミルトニアンに対して，運動方程式を立てよ．そして次の式を $p(t)$ と p で求めよ．

$$\int_0^t \mathrm{d}t'\, q(t')\,.$$

そして作用原理を使って次の式を求めよ．

$$\frac{\partial}{\partial f}\langle p', t|p''\rangle^{f} \ .$$

これより $\langle p', t|p''\rangle^{f}$ を $\langle p', t|p''\rangle^{f=0}$ を使って書け．問題 7-5a で求めたエネルギーと p 表示の波動関数に関して同じ関係式が得られることを確かめよ．

7-8a 外力の働く調和振動子(強制振動)：式(7.2.9)の運動方程式の解は $y(t_1)$ を $y(t_2)$ と κ で表している．演算子 $N_1 = y(t_1)^{\dagger} y(t_1)$ を作り，最初に n 番目の状態にあったとしてこの演算子の期待値を求めよ．これを外力によって系に与えられたエネルギーで解釈せよ．

7-8b 同様に N_1^2 に対して期待値を求め，その結果をエネルギー移行の分散で解釈せよ．

7-9 無次元の変数で書かれた式(7.2.1)のハミルトニアンと式(2.7.38)の不確定性最小状態 $|q', p'\rangle$ について：次の式($y^{\dagger\prime} = y'^{*}$)

$$\langle q', p', t_1|q'', p'', t_2\rangle^{\kappa} = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|y^{\dagger\prime}|^2}\langle y^{\dagger\prime}, t_1|y'', t_2\rangle^{\kappa}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}|y''|^2}$$

より，次の式を示せ．

$$\begin{aligned}\left|\langle q', p', t_1|q'', p'', t_2\rangle^{\kappa}\right|^2 &= \mathrm{e}^{-\left|y'\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t_1} - y''\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t_2} + \mathrm{i}\gamma\right|^2} \\ &= \mathrm{e}^{-\left|y' - y''\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t_1 - t_2)} + \mathrm{i}\gamma\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t_1}\right|^2} \ .\end{aligned}$$

なぜこの $y(t_1)$ と $y(t_2)$ の値の組み合わせが普通なのか？次の確率の規格化を確かめよ．

$$\int \frac{\mathrm{d}q'\,\mathrm{d}p'}{2\pi}\left|\langle q', p', t_1|q'', p'', t_2\rangle^{\kappa}\right|^2 = 1 \, .$$

7-10 強制振動子: 古典的極限では確率分布は無限に鋭くなる．振動子の終状態のエネルギーを，初期状態のエネルギー，$|\gamma|$，および初期の運動と外力の間の位相で表わすとどうなるか？ もし位相がわからないとすると，終状態のエネルギーの確率分布はどうなるか？

7-11 ベッセル関数の母関数を使って，ベッセル関数 $\mathrm{J}_m(z)$ を無限級数で展開せよ(これは整数の m に対してであるが，一般に成立する)．類似の母関数および無限級数展開を次の関数に対して求めよ．

$$\mathrm{I}_m(z) = \mathrm{i}^{-m}\mathrm{J}_m(\mathrm{i}z) \ .$$

両方の母関数と無限級数展開を適用して次の式を示せ．

$$\mathrm{J}_{-m}(z) = (-1)^m \mathrm{J}_m(z) \quad ただし\ m\ は整数 .$$

$\mathrm{I}_{-m}(z)$ に対する類似の関係式は何か？

7-12　ラゲールの多項式の母関数(7.4.27)において，

$$u = \sqrt{\lambda}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\phi}\,, \quad v = \sqrt{\lambda}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\phi}\,, \quad |\gamma| = \sqrt{x}$$

のように変数変換して，次の式の新しい母関数を示せ．.

$$\mathrm{e}^{-\lambda}\frac{\mathrm{I}_\alpha(2\sqrt{\lambda x})}{(\lambda x)^{\frac{1}{2}\alpha}} = \sum_{n=0}^{\infty}(-1)^n\frac{\lambda^n}{(n+\alpha)!}\mathrm{L}_n^{(\alpha)}(x)\,.$$

この式は整数 α について証明したが，一般に成立する．

7-13a　ラゲールの多項式:問題 2-26 で，$f(y^\dagger) = (y^\dagger)^\alpha$ (α は任意)，$f(y) = y^\alpha$ ($\alpha = 0, 1, 2, \ldots$) とする．ここで $y^\dagger = x$, $y = \partial/\partial x$ として，その恒等式を e^{-x} に演算せよ．これより任意の α に対して，次の母関数が得られる．

$$\frac{1}{(1-\lambda)^{1+\alpha}}\,\mathrm{e}^{-\frac{\lambda x}{1-\lambda}} = \sum_{n=0}^{\infty}\lambda^n \mathrm{L}_n^{(\alpha)}(x)\,,$$

$$ただし \quad \mathrm{L}_n^{(\alpha)}(x) = \frac{1}{n!}x^{-\alpha}\,\mathrm{e}^x\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^n x^{n+\alpha}\,\mathrm{e}^{-x}\,.$$

このラゲールの多項式の形は式(7.2.70)と同じである．また負でない整数 α に対しては，同じように恒等式を使って次の式が得られる．

$$\mathrm{L}_n^{(\alpha)}(x) = \frac{(-1)^\alpha}{n!}\,\mathrm{e}^x\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^{n+\alpha} x^n\,\mathrm{e}^{-x}\,.$$

後者は次の式と等価であることを示せ．

$$\mathrm{L}_n^{(\alpha)}(x) = \frac{(-1)^\alpha}{n!}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}-1\right)^{n+\alpha} x^n\,.$$

7-13b　問題 7-13a の母関数から，漸化式(7.3.9)および(7.3.10)を直接導け．

7-13c　$\mathrm{L}_n^{(\alpha)}(x)$ の級数展開を使って，式(7.3.10)が任意の α に対して成り立つことを示せ．

第8章

水素様原子

8.1 束縛状態

これから，ちょっとした楽しいトリックをすることにしよう．それはある種の動的な系を別の系へと変換することである．2次元の等方的な振動子のエネルギー固有状態を決定する微分方程式(7.4.60)

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\rho^2}-\frac{m^2-\frac{1}{4}}{\rho^2}+2|m|+4n_\rho+2-\rho^2\right]u(\rho)=0 \tag{8.1.1}$$

から始めることにする．ここで

$$\rho^2=2\lambda r \quad ただし \quad \lambda>0 \tag{8.1.2}$$

と変数変換すると，

$$\begin{aligned}\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho}\right)^2&=2\rho\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho^2}2\rho\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\rho^2}=\sqrt{2\lambda r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda r}\sqrt{2\lambda r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda r}\\&=\frac{2}{\lambda}\sqrt{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\sqrt{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}=\frac{2}{\lambda}\left(r\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)\end{aligned} \tag{8.1.3}$$

であるから，微分方程式は

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{1}{2r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}-\frac{m^2-\frac{1}{4}}{4r^2}+\frac{\lambda}{r}(|m|+2n_\rho+1)-\lambda^2\right]u(\rho)=0 \tag{8.1.4}$$

となる．これは恒等式(7.4.58)の $a=\frac{1}{4}$ の場合に当たるから，関数を

$$u(\rho)=C(\lambda r)^{-\frac{1}{4}}u(r) \tag{8.1.5}$$

と変換すると，(正の)比例定数 C を後ほど決めることにして，微分方程式は

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}-\frac{m^2-1}{4r^2}+\frac{\lambda(|m|+2n_r+1)}{r}-\lambda^2\right]u(r)=0 \tag{8.1.6}$$

となる．ここで動径量子数の記号を n_ρ から n_r に変えた．

任意の球対称ポテンシャル $V(r)$ の場合に，質量 M の粒子に対するシュレーディンガー方程式は

$$\left[E-\left(-\frac{\hbar^2}{2M}\nabla^2+V(r)\right)\right]\frac{1}{r}u(r)Y_{lm}(\theta,\phi)=0 \tag{8.1.7}$$

であるから，動径シュレーディンガー方程式は

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}-\frac{2M}{\hbar^2}V(r)+\frac{2ME}{\hbar^2}\right]u(r)=0 \tag{8.1.8}$$

となる．この方程式と式(8.1.6)との間には明らかな対応があり，2 次元の振動子問題は 3 次元の $1/r$ ポテンシャルの問題と等価であることがわかる．このポテンシャルを電荷 $-e$ と原子核の電荷 Ze の間の引力的クーロン*ポテンシャルを用いて

$$V(r)=-\frac{Ze^2}{r} \tag{8.1.9}$$

と表し，水素様原子のポテンシャルエネルギーであると考えることにする．すると以下の対応関係が成り立つ．

2 次元振動子	3 次元クーロン
$\frac{1}{4}(m^2-1)$	$l(l+1)$
$\lambda(\lvert m\rvert+2n_r+1)$	$\frac{2M}{\hbar^2}Ze^2$
λ^2	$\frac{2M}{\hbar^2}(-E)$.

(8.1.10)

この表から，まず対応関係

$$|m|^2\to 4l(l+1)+1=(2l+1)^2 \quad \text{すなわち} \quad |m|\to 2l+1 \tag{8.1.11}$$

が得られ，次に

$$\lambda(2l+2n_r+2)\to 2\frac{Ze^2M}{\hbar^2} \quad \text{すなわち} \quad \lambda\to\frac{Z}{na_0} \tag{8.1.12}$$

が得られる．ここで

$$n=n_r+l+1 \tag{8.1.13}$$

は主量子数（またはエネルギー量子数）であり

$$a_0=\frac{\hbar^2}{Me^2} \tag{8.1.14}$$

は(第 1)ボーア半径である．それゆえ 3 番目の対応関係を用いると

$$\frac{2M}{\hbar^2}(-E)=\frac{2}{e^2a_0}(-E)=\frac{Z^2}{n^2a_0^2} \tag{8.1.15}$$

---

*Charles–Augustin de COULOMB (1736–1806)

となり，エネルギー固有値としてボーアエネルギー

$$-E_n = \frac{Z^2 e^2}{2n^2 a_0} \qquad (n = 1, 2, 3, \ldots) \tag{8.1.16}$$

を得る．$l = 0$ および $n_r = 0$ で $n = 1$ となる場合を除いて，水素様原子のエネルギー状態は縮退している．一般にその多重度（縮重度）は

$$m(n) = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1) = \sum_{l=0}^{n-1} \left[(l+1)^2 - l^2 \right] = n^2 = 1, 4, 9, \ldots \tag{8.1.17}$$

で与えられる．

原子物理学に関連するいくつかの数値を以下に記すことにする．電子の質量 M と電荷 e は

$$M = 9.10939 \times 10^{-28}\,\mathrm{g}\,, \quad e = 4.80321 \times 10^{-10}\,\mathrm{esu} \tag{8.1.18}$$

であり，ボーア半径は

$$a_0 = 0.5292\,\text{Å} \tag{8.1.19}$$

である．ここでオングストローム*単位 $1\,\text{Å} = 10^{-8}\,\mathrm{cm}$ を用いた．ボーア半径は原子的な長さのスケールを与える．一方

$$R_\infty \equiv \frac{Me^4}{2\hbar^2} = \frac{e^2}{2a_0} = 13.606\,\mathrm{eV} \tag{8.1.20}$$

はリュードベリ†エネルギーと呼ばれ，エネルギーのスケールを与える．これを用いるとボーアエネルギーは $E_n = -R_\infty Z^2/n^2$ と表される．振動数，波数，時間，速度に対する原子スケールは，それぞれ次のように与えられる．

$$\begin{aligned} R_\infty/(2\pi\hbar) &= 3.2898 \times 10^{15}\,\mathrm{Hz}\,, \\ R_\infty/(2\pi\hbar c) &= 109\,737\,\mathrm{cm}^{-1}\,, \\ \hbar/(2R_\infty) = \hbar a_0/e^2 &= 0.0242\,\mathrm{fs}\,, \\ \sqrt{2R_\infty/M} = e^2/\hbar &= 2.188 \times 10^8\,\mathrm{cm\,s^{-1}}\,. \end{aligned} \tag{8.1.21}$$

次に水素様原子系の波動関数を調べよう．振動子の関数 $u(\rho)$ とクーロンの関数 $u(r)$ の間の関係式(8.1.5)をすでに得ているが，比例係数を決定する必要がある．振動子波動関数の規格化条件

$$1 = \int_0^\infty \mathrm{d}\rho \left[u(\rho) \right]^2 = C^2 \int_0^\infty \underbrace{\mathrm{d}\sqrt{2\lambda r}\,(\lambda r)^{-\frac{1}{2}}}_{=2^{-\frac{1}{2}}\mathrm{d}r/r} \left[u(r) \right]^2 \tag{8.1.22}$$

---

*Jonas Anders Ångström (1814–1874)　†Janne Rydberg (1854–1919)

より，係数 C は

$$C = 2^{\frac{1}{4}}\left(\int_0^\infty \mathrm{d}r\,\frac{1}{r}\big[u(r)\big]^2\right)^{-\frac{1}{2}} = 2^{\frac{1}{4}}\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle^{-\frac{1}{2}} \tag{8.1.23}$$

と，水素様状態における $1/r$ の期待値を用いて表される．しかしこれまでのところ，この状態はわかっていない．一方，クーロン波動関数の規格化条件

$$1 = \int_0^\infty \mathrm{d}r\,\big[u(r)\big]^2 = \frac{1}{C^2}\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}\rho\,\rho}{\lambda}\frac{\rho}{\sqrt{2}}\big[u(\rho)\big]^2 \tag{8.1.24}$$

より

$$C = 2^{-\frac{1}{4}}\lambda^{-\frac{1}{2}}\left\langle\rho^2\right\rangle^{\frac{1}{2}} \quad \text{ただし} \quad \left\langle\rho^2\right\rangle = \int_0^\infty \mathrm{d}\rho\,\rho^2\big[u(\rho)\big]^2 \tag{8.1.25}$$

を得る．

この $\langle\rho^2\rangle$ の値を以下のように簡単に見つけることができる．まず最初に，自由度が 1 の場合から始めよう．振動子のエネルギー固有状態は 2.4 節の停留不確定性の状態であることを 6.3 節で述べた．さらにその節の式(2.4.22)で

$$\left\langle p^2\right\rangle_n = \left\langle q^2\right\rangle_n = n + \tfrac{1}{2} \tag{8.1.26}$$

を示し，これからエネルギーを次のように再導出した．

$$\begin{aligned}\frac{E_n}{\omega} = \left\langle\frac{1}{\omega}H\right\rangle_n &= \frac{1}{2}\left(\left\langle p^2\right\rangle_n + \left\langle q^2\right\rangle_n - 1\right)\\ &= \frac{n+\frac{1}{2}+n+\frac{1}{2}-1}{2} = n\,.\end{aligned} \tag{8.1.27}$$

したがって 2 次元振動子については

$$\left\langle\rho^2\right\rangle_n = \left\langle q_1^2 + q_2^2\right\rangle_n = \underbrace{n_1 + n_2}_{=N=|m|+2n_\rho} + 1 = |m| + 2n_\rho + 1 \tag{8.1.28}$$

となるから，式(8.1.11)および(8.1.13)より

$$\left\langle\rho^2\right\rangle_n \to (2l+1) + (2\underset{\displaystyle\underset{\displaystyle n_r}{\downarrow}}{n_\rho} + 1) = 2(l + n_r + 1) = 2n \tag{8.1.29}$$

を得る．そこで，$\lambda = Z/(na_0)$ より比例係数 C が

$$C = 2^{\frac{1}{4}}(a_0/Z)^{\frac{1}{2}}n \tag{8.1.30}$$

と求まり，式(8.1.25)より

$$\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle_n = \frac{Z}{n^2 a_0} \tag{8.1.31}$$

を得る．この式については 8.2 節でさらに論じることにする．

したがって，式(8.1.2)，(8.1.5)，(8.1.12)および(8.1.30)より，式(7.4.30)の振動子の関数 $u(\rho)$ は変換されて，水素様原子の波動関数

$$u_{n,l}(r) = (-1)^{n-l-1}\sqrt{\frac{Z}{n^2 a_0}\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^{l+1} \mathrm{L}_{n-l-1}^{(2l+1)}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right)\mathrm{e}^{-\frac{Zr}{na_0}} \tag{8.1.32}$$

すなわち

$$R_{n,l}(r) = \frac{u_{n,l}(r)}{r} = (-1)^{n-l-1}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\frac{2}{n^2}\sqrt{\frac{(n-l-1)!}{(n+l)!}}x^l \mathrm{L}_{n-l-1}^{(2l+1)}(x)\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}x}$$

$$\text{ただし}\quad x \equiv \frac{2Zr}{na_0} \tag{8.1.33}$$

になることがわかった．最も簡単な例はもちろん $n_r = 0,\, n = l+1$ の場合で

$$R_{n,n-1}(r) = \left(\frac{2Z}{na_0}\right)^{\frac{3}{2}}\sqrt{\frac{1}{(2n)!}}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^{n-1}\mathrm{e}^{-\frac{Zr}{na_0}} \tag{8.1.34}$$

であり，特に最低エネルギー状態すなわち $n = 1,\, l = 0$ の基底状態では

$$R_{10}(r) = \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} 2\,\mathrm{e}^{-\frac{Zr}{a_0}} \tag{8.1.35}$$

である．規格化積分を行うと，確かに

$$\int_0^\infty \mathrm{d}r\, r^2\big[R_{n,n-1}(r)\big]^2 = \int_0^\infty \mathrm{d}x\, x^2 \frac{1}{(2n)!}x^{2n-2}\,\mathrm{e}^{-x} = 1 \tag{8.1.36}$$

となり整合性はとれている．

8.2 エネルギー固有値のパラメーター依存性

付随的に求めた表式

$$\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle_n = \frac{Z}{n^2 a_0} \tag{8.2.1}$$

から，一般的な問題に注意を向けよう．すなわち様々なパラメータ λ に対するエネルギー固有値 E の依存性を知ることで，どのような情報が得られるかという問題である．固有値方程式

$$\big[E(\lambda) - H(\lambda)\big]\big|E,\gamma\big\rangle = 0 \tag{8.2.2}$$

および，このエルミート共役

$$\big\langle E,\gamma\big|\big[E(\lambda) - H(\lambda)\big] = 0 \tag{8.2.3}$$

を考えよう．この方程式を λ で微分すると

$$\left(\frac{\partial E(\lambda)}{\partial\lambda}-\frac{\partial H(\lambda)}{\partial\lambda}\right)\left|E,\gamma\right\rangle+\left[E(\lambda)-H(\lambda)\right]\frac{\partial}{\partial\lambda}\left|E,\gamma\right\rangle=0 \tag{8.2.4}$$

となり，$\left\langle E,\gamma\right|$ を掛けると関係式

$$\frac{\partial E(\lambda)}{\partial\lambda}=\left\langle\frac{\partial H(\lambda)}{\partial\lambda}\right\rangle \tag{8.2.5}$$

を得る．この式はしばしばヘルマン*–ファインマン†の定理と呼ばれる．この定理に関する事柄についてはさらに詳細に9.6節でも再考することにする．

最初の例として1次元調和振動子を考えよう．ハミルトニアンは

$$H=\frac{p^2}{2M}+\frac{M\omega^2}{2}x^2=T+V \tag{8.2.6}$$

で，$T=p^2/(2M)$ は運動エネルギー，そして $V=\frac{1}{2}M\omega^2x^2$ はポテンシャルエネルギーである．この系の n 番目のエネルギー固有値を思い出すと

$$E=\langle T\rangle+\langle V\rangle=(n+\tfrac{1}{2})\hbar\omega \tag{8.2.7}$$

であり，質量 M には依存せず振動数 ω には線形に依存する．この式を M で微分すると

$$M\frac{\partial H}{\partial M}=-T+V\,,\quad M\frac{\partial E}{\partial M}=0\qquad\text{したがって}\quad\langle T\rangle=\langle V\rangle \tag{8.2.8}$$

となり，ω で微分すると

$$\omega\frac{\partial H}{\partial\omega}=2V\,,\quad\omega\frac{\partial E}{\partial\omega}=E\qquad\text{したがって}\quad 2\langle V\rangle=E \tag{8.2.9}$$

となる．これらの結果から，

$$\langle T\rangle=\langle V\rangle=\tfrac{1}{2}E \tag{8.2.10}$$

を得る．当然ながら $\langle T\rangle$ と $\langle V\rangle$ の和は正しく全エネルギーを与える．

次に3次元の水素様原子を調べよう．ハミルトニアンは

$$H=T+V\qquad\text{ただし}\quad T=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2M}\,,\ V=-\frac{Ze^2}{r} \tag{8.2.11}$$

であり，エネルギー固有値は

$$E=-\frac{Z^2e^4M}{2n^2\hbar^2} \tag{8.2.12}$$

となる．これらの式を質量 M で微分すると

$$M\frac{\partial H}{\partial M}=-T\,,\quad M\frac{\partial E}{\partial M}=E\qquad\text{したがって}\quad\langle T\rangle=-E \tag{8.2.13}$$

---

*Hans HELLMANN (b. 1903)　†Richard Phillips FEYNMAN (1918–1988)

となり，核電荷 Z で微分すると

$$Z\frac{\partial H}{\partial Z} = V\ , \quad Z\frac{\partial E}{\partial Z} = 2E \qquad \text{したがって} \quad \langle V\rangle = 2E \tag{8.2.14}$$

となって，和は

$$\langle T\rangle + \langle V\rangle = -E + 2E = E \tag{8.2.15}$$

と正しいエネルギーを与える．式(8.2.14)は

$$-Ze^2\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle = -\frac{Z^2e^2}{n^2a_0} \tag{8.2.16}$$

と表すことができるから，この節の初めに記した表式

$$\left\langle\frac{1}{r}\right\rangle = \frac{Z}{n^2a_0} \tag{8.2.17}$$

と一致する．

8.3　ビリアル定理

この節では q および p のスケールを変える変換を考える．3 次元系で

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2M} + V(\boldsymbol{r}) = T + V\ , \qquad L = \boldsymbol{p}\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} - H \tag{8.3.1}$$

の場合に，この種の無限小変換

$$\delta\boldsymbol{r} = \delta\lambda(t)\,\boldsymbol{r}\ , \quad \delta\boldsymbol{p} = -\delta\lambda(t)\,\boldsymbol{p} \tag{8.3.2}$$

を考えよう．すると，この変換により誘起されたラグランジアンの変化は

$$\begin{aligned}\delta L &= \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\delta\lambda + 2\delta\lambda\,T - \delta\lambda\,\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\nabla}V \\ &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\delta\lambda\,\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}\right) + \delta\lambda\left[-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}) + 2T - \boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\nabla}V\right]\end{aligned} \tag{8.3.3}$$

となる．この $\delta\lambda$ による変分に定常作用原理 $\delta W_{12} = G_1 - G_2$ を適用すると

$$G_\lambda = \delta\lambda\,\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} \tag{8.3.4}$$

および

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}) = 2T - \boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\nabla}V \tag{8.3.5}$$

を得るが，この結果はビリアル定理として知られている．実際，G_λ はスケール変換の生成演算子であり，

$$\begin{aligned}\delta\boldsymbol{r} &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{r}, G_\lambda] = \frac{\partial G_\lambda}{\partial\boldsymbol{p}} = \delta\lambda\,\boldsymbol{r}\ , \\ \delta\boldsymbol{p} &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{p}, G_\lambda] = -\frac{\partial G_\lambda}{\partial\boldsymbol{r}} = -\delta\lambda\,\boldsymbol{p}\end{aligned} \tag{8.3.6}$$

を満たすことに注意しよう．

ビリアル定理が重要である理由を以下に述べる．決まったエネルギー E を持つ状態すなわち**定常状態**に対して，あらわな時間依存性を持たない演算子，言い換えると $F=F(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$ であって $\partial F/\partial t=0$ となる演算子の時間微分 $\mathrm{d}F/\mathrm{d}t$ の期待値は，

$$\left\langle \frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t} \right\rangle_E = \langle E|\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(F\underset{\substack{\downarrow\\E}}{H} - \underset{\substack{\downarrow\\E}}{H}F)|E\rangle = 0 \tag{8.3.7}$$

でわかるようにゼロとなる．ビリアル定理はこの結論と結び付き効力を発揮する．この結果を $F=\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}$ に応用すると，定常状態(≡ハミルトニアンの固有状態)における期待値の間に

$$2\langle T\rangle = \langle \boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\nabla}V\rangle \tag{8.3.8}$$

の関係が成り立つことがわかる．もし $V(\boldsymbol{r})$ の次数が n であれば，すなわち $V\propto r^n$ ならば，

$$\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{\nabla}V = r\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}V = nV \tag{8.3.9}$$

となり，したがって関係式

$$2\langle T\rangle = n\langle V\rangle \tag{8.3.10}$$

を得る．$\langle T\rangle+\langle V\rangle=E$ と結び付けると

$$\langle T\rangle = \frac{n}{n+2}E\,, \qquad \langle V\rangle = \frac{2}{n+2}E \tag{8.3.11}$$

となる．振動子は $n=2$ であるから

$$\langle T\rangle = \langle V\rangle = \tfrac{1}{2}E \tag{8.3.12}$$

となり，水素様原子ではクーロンポテンシャルで $n=-1$ であるから

$$\langle T\rangle = -E\,, \qquad \langle V\rangle = 2E \tag{8.3.13}$$

となる．これらはすでに8.2節で示した通りである．

波動関数 $u(r)$ により記述された1次元の動径運動という見方に立つと，$p_r \triangleq \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\frac{\partial}{\partial r}$ および

$$\boldsymbol{p}^2 \to p_r^2 + \frac{l(l+1)\hbar^2}{r^2} \tag{8.3.14}$$

を用いて，ハミルトニアンは実効的に

$$H \to H_l = \frac{p_r^2}{2M} + \frac{l(l+1)\hbar^2}{2Mr^2} + V(r) \tag{8.3.15}$$

と表される．そこで式(8.2.5)で $\lambda=l$ とすると

$$\frac{\partial E}{\partial l} = \frac{\hbar^2}{M}\left(l+\tfrac{1}{2}\right)\left\langle \frac{1}{r^2}\right\rangle \tag{8.3.16}$$

となる．クーロンポテンシャルの場合には，$E=-\frac{1}{2}(Z^2e^2/a_0)(n_r+l+1)^{-2}$ であるから

$$\frac{\partial E}{\partial l}=\frac{Z^2e^2}{a_0}\frac{1}{n^3}=\frac{\hbar^2}{M}\left(l+\tfrac{1}{2}\right)\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle \tag{8.3.17}$$

すなわち

$$\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle=\frac{Z^2}{a_0^2}\frac{1}{n^3\left(l+\frac{1}{2}\right)} \tag{8.3.18}$$

を得る．一方，3 次元の等方的振動子の場合には $E=\hbar\omega(l+2n_r)$ であり，したがって

$$\frac{\partial E}{\partial l}=\hbar\omega=\frac{\hbar^2}{M}\left(l+\tfrac{1}{2}\right)\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle \tag{8.3.19}$$

すなわち

$$\left\langle\frac{1}{r^2}\right\rangle=\frac{M\omega}{\hbar}\frac{1}{l+\frac{1}{2}} \tag{8.3.20}$$

を得る．

もう少し洞察力を要する平均操作を用いる例を考えよう．シュレーディンガー方程式(8.1.8)

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}+\frac{2M}{\hbar^2}(E-V)\right]u(r)=0 \tag{8.3.21}$$

を r で微分すると(ダッシュは r 微分を表す)

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}-\frac{l(l+1)}{r^2}+\frac{2M}{\hbar^2}(E-V)\right]u'=\left[-2\frac{l(l+1)}{r^3}+\frac{2M}{\hbar^2}V'\right]u \tag{8.3.22}$$

となり，この方程式に u を掛け，式(8.3.21)に u' を掛けて引き算をしてまとめると

$$\left[-2\frac{l(l+1)}{r^3}+\frac{2M}{\hbar^2}V'\right]u^2=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\left(uu''-u'^2\right) \tag{8.3.23}$$

となる．この式の両辺を積分して

$$-2l(l+1)\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle+\frac{2M}{\hbar^2}\langle V'\rangle=\left[u'(0)\right]^2=\left[R(0)\right]^2 \tag{8.3.24}$$

を得る．ここで $r\to 0$ で $uu''\to 0$ となることを用いたが，この性質は $r\gtrsim 0$ では $u(r)\propto r^{l+1}$ であることから直ちにわかる．

$l\neq 0$ に対しては，式(8.3.24)は

$$\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle=\frac{1}{l(l+1)}\frac{M}{\hbar^2}\langle V'\rangle \tag{8.3.25}$$

であり，したがって 3 次元の等方的振動子 $V=\frac{1}{2}M\omega^2r^2$ では

$$\left\langle\frac{1}{r^3}\right\rangle=\left(\frac{M\omega}{\hbar}\right)^2\frac{1}{l(l+1)}\langle r\rangle \tag{8.3.26}$$

となり，クーロン場では$(l \neq 0)$

$$\left\langle \frac{1}{r^3} \right\rangle = \frac{1}{l(l+1)} \frac{M}{\hbar^2} Ze^2 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{Z^2}{a_0^3} \frac{1}{n^3} \frac{1}{l(l+\frac{1}{2})(l+1)} \tag{8.3.27}$$

となる．

ところで，$l=0$ に対しては

$$\frac{2M}{\hbar^2} \langle V' \rangle = \big[R(0)\big]^2 \tag{8.3.28}$$

であるから，3次元の振動子に対しては

$$2\left(\frac{M\omega}{\hbar}\right)^2 \langle r \rangle = \big[R(0)\big]^2 \tag{8.3.29}$$

となり，クーロンポテンシャルに対しては

$$\big[R(0)\big]^2 = \frac{2M}{\hbar^2} Ze^2 \left\langle \frac{1}{r^2} \right\rangle = \frac{Z^3}{a_0^3} \frac{4}{n^3} \tag{8.3.30}$$

となる．この後者の結果は非常に簡単であるが，これは本当に式(8.1.33)に $l=0$ および $r=0$ を代入した式

$$R_{n,0}(0) = (-1)^{n-1} \left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} \frac{2}{n^2} \sqrt{\frac{1}{n}}\, \mathrm{L}_{n-1}^{(1)}(0) \tag{8.3.31}$$

から導かれるだろうか？ 答えは然りである．なぜなら式(7.2.76)によれば

$$\mathrm{L}_n^{(\alpha)}(0) = \frac{(n+\alpha)!}{n!\,\alpha!} \qquad \text{したがって} \quad \mathrm{L}_{n-1}^{(1)}(0) = \frac{n!}{(n-1)!} = n \tag{8.3.32}$$

となるからである．3次元の振動子に関しては，式(8.3.29)および(7.5.26)で無次元の変数を0とし，さらに $l=0$ とすると

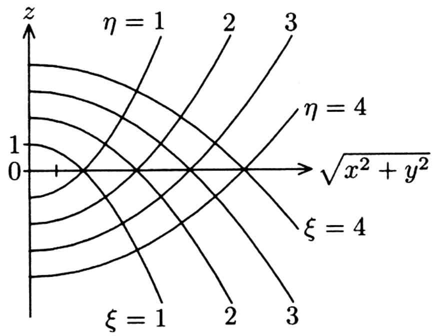
$$\begin{aligned} \langle \rho \rangle = \frac{1}{2}\left[\frac{u(r)}{r}(r \to 0)\right]^2 &= \frac{1}{2} 2 \frac{n_\rho!}{(n_\rho + \frac{1}{2})!} \left[\mathrm{L}_{n_\rho}^{(\frac{1}{2})}(0)\right]^2 \\ &= \frac{n_\rho!}{(n_\rho + \frac{1}{2})!} \left[\frac{(n_\rho + \frac{1}{2})!}{n_\rho!\,\frac{1}{2}!}\right]^2 = \frac{(n_\rho + \frac{1}{2})!}{n_\rho!\,\left(\frac{1}{2}!\right)^2} \end{aligned} \tag{8.3.33}$$

を得る．具体的な検証については問題 8-16 を参照のこと．

8.4　放物線座標

クーロンポテンシャルの不思議さは振動子との関連性だけでは終わらない．この問題は球対称性という明白な性質を持つにもかかわらず，優先された方向を持ちしかも役に立つ別種の座標系が存在する．それは放物線座標 $(\xi > 0, \eta > 0, 0 \leq \phi \leq 2\pi)$ であり，以下のように定義されている．

$$x = 2\sqrt{\xi\eta}\cos\phi\,,\qquad y = 2\sqrt{\xi\eta}\sin\phi\,,\qquad z = \xi - \eta\,, \tag{8.4.1}$$



位置ベクトル $\boldsymbol{r}$ の長さ r は

$$r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2} = \sqrt{4\xi\eta + (\xi - \eta)^2} = \xi + \eta \tag{8.4.2}$$

と表され，関係式

$$\xi = \tfrac{1}{2}(r + z)\,, \qquad \eta = \tfrac{1}{2}(r - z) \tag{8.4.3}$$

は z 方向が特権的な役割を持っていることを強調している．式(7.4.39)および(7.4.42)において，

$$h_\xi = \sqrt{\frac{\xi + \eta}{\xi}}\,, \quad h_\eta = \sqrt{\frac{\xi + \eta}{\eta}}\,, \quad h_\phi = 2\sqrt{\xi\eta}\,, \qquad h = 2(\xi + \eta) \tag{8.4.4}$$

となるから，隣接点間の距離の 2 乗は(式(7.4.41)を参照)

$$\mathrm{d}s^2 = \frac{\xi + \eta}{\xi}(\mathrm{d}\xi)^2 + \frac{\xi + \eta}{\eta}(\mathrm{d}\eta)^2 + 4\xi\eta(\mathrm{d}\phi)^2 \tag{8.4.5}$$

であり，ラプラスの微分演算子は(式(7.4.45)を参照)

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\nabla}^2 &= \frac{1}{2(\xi + \eta)}\left[\frac{\partial}{\partial\xi}2\xi\frac{\partial}{\partial\xi} + \frac{\partial}{\partial\eta}2\eta\frac{\partial}{\partial\eta} + \frac{\partial}{\partial\phi}\frac{\xi + \eta}{2\xi\eta}\frac{\partial}{\partial\phi}\right] \\ &= \frac{1}{\xi + \eta}\left[\frac{\partial}{\partial\xi}\xi\frac{\partial}{\partial\xi} + \frac{\partial}{\partial\eta}\eta\frac{\partial}{\partial\eta}\right] + \frac{1}{4\xi\eta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2}\end{aligned} \tag{8.4.6}$$

で与えられる．このラプラスの微分演算子とクーロンポテンシャル

$$V = -\frac{Ze^2}{r} = -\frac{Ze^2}{\xi + \eta} \tag{8.4.7}$$

はともに分母に $\xi + \eta$ があるから，$(\xi + \eta)$ を掛けた後ではシュレーディンガー方程式

$$\left[\boldsymbol{\nabla}^2 + \frac{2M}{\hbar^2}(E - V)\right]\psi = 0 \tag{8.4.8}$$

は

$$\left[\frac{\partial}{\partial\xi}\xi\frac{\partial}{\partial\xi} + \frac{1}{4\xi}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{2ME}{\hbar^2}\xi + \frac{\partial}{\partial\eta}\eta\frac{\partial}{\partial\eta} + \frac{1}{4\eta}\frac{\partial^2}{\partial\phi^2} + \frac{2ME}{\hbar^2}\eta + \frac{2Z}{a_0}\right]\psi = 0 \tag{8.4.9}$$

と表される．ここで $(2M/\hbar^2)Ze^2 = 2Z/a_0$ を用いた．

まず最初に，L_z の固有値 $L'_z = m\hbar$（波動関数の因子 $(2\pi)^{-\frac{1}{2}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\phi}$）で状態を分類できることは明らかである．するとこの方程式は ξ と η についての微分演算子の和であるから，波動関数を

$$\psi = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\phi}\frac{1}{\sqrt{\xi}}u(\xi)\frac{1}{\sqrt{\eta}}u(\eta) \tag{8.4.10}$$

と表すと，シュレーディンガー方程式は1対の方程式

$$\begin{aligned}\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2} - \frac{m^2-1}{4\xi^2} + \frac{2ME}{\hbar^2} + \frac{2Z_1}{a_0\xi}\right]u(\xi) = 0\,, \\ \left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\eta^2} - \frac{m^2-1}{4\eta^2} + \frac{2ME}{\hbar^2} + \frac{2Z_2}{a_0\eta}\right]u(\eta) = 0\end{aligned} \tag{8.4.11}$$

に分離する．ここで，$Z_1 + Z_2 = Z$ である．これらの微分方程式と $u(r)$ の微分方程式，すなわち $(2M/\hbar^2)V = -2Z/(a_0 r)$ を式(8.1.8)に代入して得た方程式

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2ME}{\hbar^2} + \frac{2Z}{a_0 r}\right]u(r) = 0 \tag{8.4.12}$$

とを並べて比較してみる．この式の固有値は

$$-\frac{2ME}{\hbar^2} = \frac{(Z/a_0)^2}{(n_r+l+1)^2}\,, \qquad n_r, l = 0, 1, 2, \ldots \tag{8.4.13}$$

であることはすでに示しており，後の便宜上

$$n_r + l + 1 = \frac{Z/a_0}{\sqrt{-2ME/\hbar^2}} \tag{8.4.14}$$

と書き換える．対応関係 $|m| \leftrightarrow 2l+1$ があるから，ξ と η の方程式でそれぞれ $k_1 = 0, 1, \ldots$，および，$k_2 = 0, 1, \ldots$ を $n_r = 0, 1, \ldots$ に対応する量子数として用いると，

$$k_1 + \tfrac{1}{2}\bigl(|m|+1\bigr) = \frac{Z_1/a_0}{\sqrt{-2ME/\hbar^2}}\,, \qquad k_2 + \tfrac{1}{2}\bigl(|m|+1\bigr) = \frac{Z_2/a_0}{\sqrt{-2ME/\hbar^2}} \tag{8.4.15}$$

を得る．これらを加えると，$Z_1 + Z_2 = Z$ より

$$k_1 + k_2 + |m| + 1 \equiv n = \frac{Z/a_0}{\sqrt{-2ME/\hbar^2}} \tag{8.4.16}$$

となり，したがって

$$\frac{Z_1}{Z} = \frac{k_1 + \frac{1}{2}\bigl(|m|+1\bigr)}{n}\,, \qquad \frac{Z_2}{Z} = \frac{k_2 + \frac{1}{2}\bigl(|m|+1\bigr)}{n} \tag{8.4.17}$$

および

$$E = -\frac{Z^2e^2}{2n^2a_0}\,, \qquad n = 1, 2, \ldots \tag{8.4.18}$$

を得るが，これはもちろんよく知られたボーアエネルギーである．

このように作られた量子数 n の状態の多重度は何だろうか? ここで $k_1, k_2 = 0, 1, \ldots$ であり，一方，$m = 0, \pm1, \pm2, \ldots$ であることに注意しよう．2次元と3次元での振動子のエネルギー状態の多重度を決めるに際してすでに知っているように，負でない整数に対しては

$$n_1 + n_2 = N \ : \qquad m(N) = N + 1\,,$$
$$n_1 + n_2 + n_3 = N \ : \qquad m(N) = \frac{1}{2}(N+1)(N+2) \tag{8.4.19}$$

が成り立つから，$n_3 = 0$ が排除されている場合には(これを n_3' と記す)，

$$\begin{aligned} n_1 + n_2 + n_3' = N \ : \qquad m(N) &= \frac{1}{2}(N+1)(N+2) - (N+1) \\ &= \frac{1}{2}N(N+1) \end{aligned} \tag{8.4.20}$$

を得る．したがって

$$k_1 + k_2 + |m| = n - 1 \tag{8.4.21}$$

に関しては，$m = 0$ では n 個の状態が，$m \neq 0$ では $\frac{1}{2}n(n-1)$ の2倍の状態があるから，多重度は

$$m(n) = n + 2 \times \frac{1}{2}n(n-1) = n^2 \tag{8.4.22}$$

となり，もちろんこれは以前に式(8.1.17)で求めた答えと一致している．

8.5 弱い外部電場

一様な電場 $\boldsymbol{F}$ が加わった場合にエネルギーレベルにどのような効果が現れるかを調べるためには，放物座標系が役に立つ．電場が z 軸方向に向いているとすると，電子(電荷 $-e$)のポテンシャルエネルギーは

$$V = -\frac{Ze^2}{r} + eFz = -e\underbrace{\left(\frac{Ze}{r} - Fz\right)}_{\text{静電ポテンシャル}} \tag{8.5.1}$$

であり，放物線座標では

$$V = -\frac{Ze^2}{\xi + \eta} + eF(\xi - \eta) = -\frac{1}{\xi + \eta}\left[Ze^2 - eF\left(\xi^2 - \eta^2\right)\right] \tag{8.5.2}$$

と表される．したがって，波動関数の因子化(変数分離)はこの場合にも成り立ち，方程式は

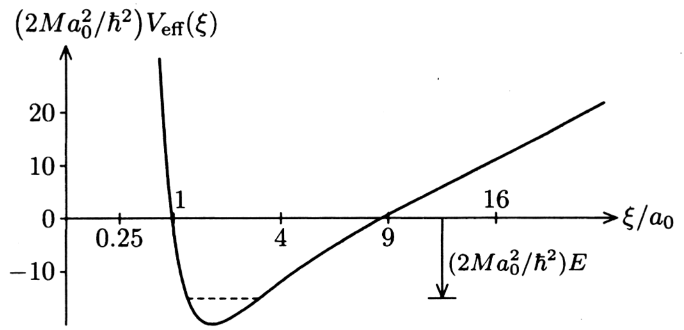
$$\begin{aligned} &\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\xi^2} - \frac{m^2-1}{4\xi^2} + \frac{2ME}{\hbar^2} + \frac{2Z_1}{a_0\xi} - \frac{2F}{ea_0}\xi\right] u(\xi) = 0\,, \\ &\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\eta^2} - \frac{m^2-1}{4\eta^2} + \frac{2ME}{\hbar^2} + \frac{2Z_1}{a_0\eta} + \frac{2F}{ea_0}\eta\right] u(\eta) = 0 \end{aligned} \tag{8.5.3}$$

と 2 つに分離できる．

さらに議論を続ける前に，しばらくこの 2 つの運動に対する有効ポテンシャル V_{eff} の役割がどのようなものであるかを調べよう．具体的に表すために $m=18$, $F=\frac{1}{2}e/a_0^2$, $Z_1=Z_2=42$ とし，横軸を ξ^2 および η^2 に線形に目盛りをとり有効ポテンシャルを図示してみよう．まず有効ポテンシャル

$$V_{\mathrm{eff}}(\xi)=\frac{\hbar^2}{2M}\left[\frac{m^2-1}{4\xi^2}-\frac{2Z_1}{a_0\xi}+\frac{2F}{ea_0}\xi\right] \tag{8.5.4}$$

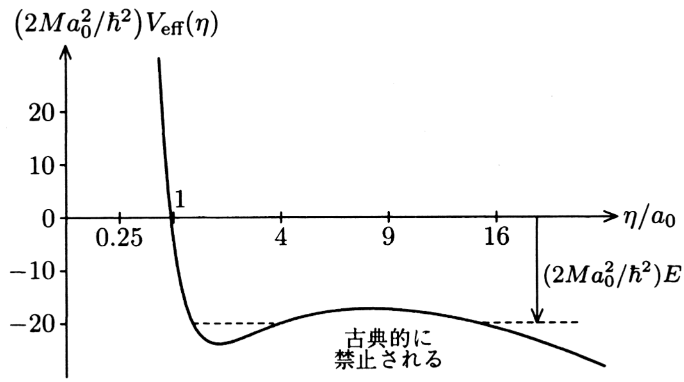
を図示すると



であり，最小値の付近に電子を束縛することがわかる．一方

$$V_{\mathrm{eff}}(\eta)=\frac{\hbar^2}{2M}\left[\frac{m^2-1}{4\eta^2}-\frac{2Z_1}{a_0\eta}-\frac{2F}{ea_0}\eta\right] \tag{8.5.5}$$

を図示すると



であり，大きな η の値では任意に大きな負の値をとることがわかる．後者の状況では，電子を原子の外側に見出す確率，すなわちイオン化する確率が存在する．しかしこれが実際に起こるためには非常に強い電場を必要とする．なぜならば，古典的に禁止さ

れる領域内における波動関数の指数関数的減衰に打ち勝たなければならないからである(6.7 節の議論を思い起こそう)．この節では弱い電場にのみ興味がある．

ところで式(8.5.3)の $u(\xi)$ の方程式は**上り坂方程式**，そして $u(\eta)$ の方程式は**下り坂方程式**として知られているが，明らかにこれらの名称は有効ポテンシャルの形状によって示唆されている．

ここで $u(\xi)$ の方程式内の F をパラメータと考え，E と Z_1 が変化する(固定されているのは Z である)ことを予期しながらこの方程式を F で微分し，次に $u(\xi)$ を掛けて積分すると

$$\frac{2M}{\hbar^2}\frac{\partial E}{\partial F} = \frac{2}{ea_0}\langle\xi\rangle - \frac{2}{a_0}\frac{\partial Z_1}{\partial F}\left\langle\frac{1}{\xi}\right\rangle \tag{8.5.6}$$

を得る．もちろん，もし Z_1 だけを変えれば

$$\frac{2M}{\hbar^2}\frac{\partial E}{\partial Z_1} = -\frac{2}{a_0}\left\langle\frac{1}{\xi}\right\rangle \tag{8.5.7}$$

を得るので，

$$\frac{\partial E}{\partial F} - \frac{\partial E}{\partial Z_1}\frac{\partial Z_1}{\partial F} = e\langle\xi\rangle \tag{8.5.8}$$

となる．左辺は直接書き下すことができたであろう．これは E が F にあらわに依存しているために生じる変化である．同様にして

$$\frac{\partial E}{\partial F} - \frac{\partial E}{\partial Z_2}\frac{\partial Z_2}{\partial F} = -e\langle\eta\rangle \tag{8.5.9}$$

も成り立つ．

E の F に対する線形依存性を得るために，$F = 0$ の極限でこれらの結果を用いることにする．最初に ξ に関しては

$$E = -\frac{Z_1^2}{2a_0}\frac{1}{\left[k_1 + \frac{1}{2}\left(|m| + 1\right)\right]^2} \tag{8.5.10}$$

であることを知っているから，その結果

$$Z_1\frac{\partial E}{\partial Z_1} = -2E \tag{8.5.11}$$

を得る．同様にして

$$Z_2\frac{\partial E}{\partial Z_2} = -2E \tag{8.5.12}$$

も得る．

次に式(8.5.8)と(8.5.9)にそれぞれ Z_1 と Z_2 を掛けてから加え，さらに $F = 0$ とすると

$$\underbrace{(Z_1 + Z_2)}_{=Z}\frac{\partial E}{\partial F} - 2E\underbrace{\frac{\partial}{\partial F}(Z_1 + Z_2)}_{=0} = eZ_1\langle\xi\rangle - eZ_2\langle\eta\rangle \tag{8.5.13}$$

となるから，

$$\left.\frac{\partial E}{\partial F}\right|_{F=0}=\frac{e}{Z}\left[Z_1\langle\xi\rangle_{k_1}-Z_2\langle\eta\rangle_{k_2}\right]\Big|_{F=0} \tag{8.5.14}$$

を得る．

問題 8-1d によれば，極座標でのクーロン場に対しては

$$\langle r\rangle_{nl}=\frac{a_0}{Z}\left[3n^2-l(l+1)\right] \tag{8.5.15}$$

が成り立つ．そこで対応関係

$$2l+1\leftrightarrow|m|\,,\quad Z\leftrightarrow Z_{1,2}\,,\quad n\leftrightarrow k_{1,2}+\tfrac{1}{2}\big(|m|+1\big) \tag{8.5.16}$$

を用いれば

$$Z_1\langle\eta\rangle_{k_1,|m|}=\frac{a_0}{2}\left[3\left(k_1+\frac{|m|+1}{2}\right)^2-\frac{m^2-1}{4}\right]\,,$$

$$Z_2\langle\eta\rangle_{k_2,|m|}=\frac{a_0}{2}\left[3\left(k_2+\frac{|m|+1}{2}\right)^2-\frac{m^2-1}{4}\right] \tag{8.5.17}$$

となるから最終的な結果として，

$$\left.\frac{\partial E}{\partial F}\right|_{F=0}=\frac{e}{Z}\frac{3a_0}{2}(k_1-k_2)\underbrace{(k_1+k_2+|m|+1)}_{=n} \tag{8.5.18}$$

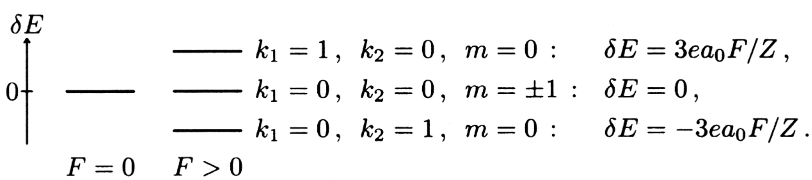
が導かれる．

この $F=0$ での厳密な結果から，弱い電場により生じるエネルギー変化に対する近似的な表現

$$\delta E_{n,k_1,k_2}=\frac{3}{2}\frac{ea_0}{Z}Fn(k_1-k_2) \tag{8.5.19}$$

を得る．この結果は線形シュタルク*効果に適用された1次の摂動論の例である．

量子数 k_1 および k_2 は各々0から $n-1$ の範囲を動き，したがって k_1-k_2 は $n-1$ から $-(n-1)$ の間の値をとり，全部で $2n-1$ 個の等間隔に開いた値を与える．たとえば $n=2$ では $n^2=4$ 個の状態があり，エネルギーレベルは以下のようになる．



このように n^2 重の縮退は完全には除かれず，$2n-1$ 個の異なったエネルギーレベルが現れるだけである．一般に1つのエネルギー，すなわち1つの k_1-k_2 の多重度

---

*Johannes STARK (1874–1957)

はいかほどであろうか？ まず $k_1 > k_2$ であると仮定しよう．すると k_1 および k_2 を 1 ずつ，$k_1 = n-1$（最初の場合を含めて全部で $n-k_1$ 個の場合がある）に達するまで次々と増加したり，また k_1 および k_2 を 1 ずつ，$k_2 = 0$（さらに k_2 個の場合がある）まで減少しても $k_1 - k_2$ は同じ値に留まり，したがって全部で

$$m(n, k_1, k_2) = n - |k_1 - k_2| \tag{8.5.20}$$

のシュタルクエネルギーシフトの多重度がある．全状態数は

$$\sum_{k=-(n-1)}^{n-1} \big(n - |k|\big) = n + 2\underbrace{\sum_{k=1}^{n-1}(n-k)}_{=(n-1)n} = n^2 \tag{8.5.21}$$

となり，この多重度は式(8.1.17)や(8.4.22)からすでに知られている．

8.6 弱い外部磁場

一様電場で縮退が完全には解けないならば，一様磁場は残りの縮退に対してどのような効果を及ぼすであろうか？ という疑問が自然に浮かんでくる．与えられた電磁場で荷電粒子がどのように振る舞うかを一般的に考える時機がやって来たようだ．

質量が M の自由粒子のラグランジアンは

$$L = \boldsymbol{p}\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} - \frac{1}{2M}\boldsymbol{p}^2 \tag{8.6.1}$$

である．(今後，非可換の演算子の積は常に対称化するものと理解しておこう．したがって，$\boldsymbol{p}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r}$ は $\frac{1}{2}\boldsymbol{p}\cdot\mathrm{d}\boldsymbol{r} + \frac{1}{2}\mathrm{d}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}$ と読まれなければならない)．クーロン場や一定電場の問題ですでに知っているように，$\Phi(\boldsymbol{r})$ が静電ポテンシャルすなわちスカラーポテンシャルであり，$\boldsymbol{E} = -\boldsymbol{\nabla}\Phi$ で表される電場中の電荷 e（ここでは正でも負でもよい）を持つ粒子のラグランジアンは

$$L = \boldsymbol{p}\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} - \frac{1}{2M}\boldsymbol{p}^2 - e\Phi(\boldsymbol{r}) \tag{8.6.2}$$

で与えられる．ここで磁場を印加することにしたい．考慮すべき重要なことは，磁場は速度 $\boldsymbol{v}$ で記述される**運動**と相互作用するということである．おそらく読者は速度は当然 $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{p}/M$ で表されると考えるかもしれない．しかし答えは否である．電場の存在がエネルギーの意味を変えて

$$\frac{\boldsymbol{p}^2}{2M} \to \underbrace{\frac{\boldsymbol{p}^2}{2M}}_{\text{運動},} + \underbrace{e\Phi}_{\text{ポテンシャルエネルギー}} \tag{8.6.3}$$

となると同じように，磁場の存在は運動量の意味を変更し，もはや $\boldsymbol{p}$ は $M\boldsymbol{v}$ とはなら

ない．この理由から $\boldsymbol{v}$ を独立変数として導入することが必要になる．そこでラグランジアン L を

$$L(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},\boldsymbol{v}) = \boldsymbol{p}\cdot\left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} - \boldsymbol{v}\right) + \frac{1}{2}M\boldsymbol{v}^2 - e\Phi(\boldsymbol{r})$$
$$= \boldsymbol{p}\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} - H(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},\boldsymbol{v})\ , \tag{8.6.4}$$

とし，ハミルトニアンを

$$H = \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{v} - \frac{1}{2}M\boldsymbol{v}^2 + e\Phi \tag{8.6.5}$$

とする．ハミルトン・ハイゼンベルクの運動方程式は

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}} = \boldsymbol{v}\ ,$$
$$-\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{r}} = e\boldsymbol{\nabla}\Phi = -e\boldsymbol{E} \tag{8.6.6}$$

であり，$\boldsymbol{v}$ の時間微分は現れないから

$$0 = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{v}} = \boldsymbol{p} - M\boldsymbol{v} \tag{8.6.7}$$

と簡単になる．したがって $\boldsymbol{v}$ は速度 $\mathrm{d}\boldsymbol{r}/\mathrm{d}t$ であり，運動量 $\boldsymbol{p}$ は $M\mathrm{d}\boldsymbol{r}/\mathrm{d}t$ であることがわかる．これらの式から，ニュートンの運動方程式に外見上は類似の方程式(力の方程式と呼ぶことにする)

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} = M\frac{\mathrm{d}^2 r}{\mathrm{d}t^2} = e\boldsymbol{E} \tag{8.6.8}$$

を得る．ここでもし単純に $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{p}/M$ とすれば

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2M} + e\Phi \tag{8.6.9}$$

に戻ることになる．

しかし，ここで $\boldsymbol{v}$ に依存する相互作用を加えることにしたい．最も簡単な可能性は $\boldsymbol{v}$ に新しいベクトルを掛けることである．ハミルトニアンを実際に

$$H = \boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{v} - \frac{1}{2}M\boldsymbol{v}^2 + e\Phi(\boldsymbol{r}) - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{v} \tag{8.6.10}$$

と書いてみよう．ここで $c = 2.99792\times10^{10}\,\mathrm{cm/s}$ は光速度である．新しい運動方程式は式(8.6.6)や(8.6.7)の代わりに，

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{p}} = \boldsymbol{v}\ ,$$
$$-\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t} = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{r}} = e\boldsymbol{\nabla}\Phi - \frac{e}{c}\boldsymbol{\nabla}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{v}\ ,$$
$$0 = \frac{\partial H}{\partial \boldsymbol{v}} = \boldsymbol{p} - M\boldsymbol{v} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) \tag{8.6.11}$$

となる．もちろん2番目の式の $\boldsymbol{\nabla}$ は独立変数 $\boldsymbol{v}$ に作用しない．しかしながら3番目の式が $\boldsymbol{v}$ を $\boldsymbol{p}$ と $\boldsymbol{r}$ の関数として定義していることをすぐ後で受け入れるので，ベクトルの恒等式

$$\boldsymbol{\nabla A}(\boldsymbol{r})\cdot\boldsymbol{v}=\boldsymbol{v}\times\big(\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A}\big)+\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\nabla A} \tag{8.6.12}$$

を用いて，2番目の式を等価な式

$$-\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t}=e\boldsymbol{\nabla}\Phi-\frac{e}{c}\boldsymbol{v}\times\big(\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A}\big)-\frac{e}{c}\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\nabla A} \tag{8.6.13}$$

に書き直すと便利である．

そこで，(8.6.11)の最初の式は $\boldsymbol{v}$ が依然として速度 $\mathrm{d}\boldsymbol{r}/\mathrm{d}t$ であることを示しているが，3番目の式は $\boldsymbol{p}$ が変化して

$$\boldsymbol{p}=\underbrace{M\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}}_{\text{運動学的運動量,}}\quad+\quad\underbrace{\frac{e}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})}_{\text{ポテンシャル運動量}} \tag{8.6.14}$$

となることを示している．この式を時間で微分すると

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{p}}{\mathrm{d}t}=M\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t^2}+\frac{e}{c}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) \tag{8.6.15}$$

となり，式(8.6.13)と組み合わせて力の方程式

$$\begin{aligned}M\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t^2}=&-e\boldsymbol{\nabla}\Phi+\frac{e}{c}\boldsymbol{v}\times\big[\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\big]\\&+\frac{e}{c}\Big[\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\nabla A}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\Big]\end{aligned} \tag{8.6.16}$$

を得る．$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$ を評価するためには H を $\boldsymbol{p}$ と $\boldsymbol{r}$ の関数として知る必要があり，それは

$$\begin{aligned}H&=\underbrace{\Big(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\Big)}_{=M\boldsymbol{v}}\cdot\boldsymbol{v}-\frac{1}{2}Mv^2+e\Phi=\frac{1}{2}M\boldsymbol{v}^2+e\Phi\\&=\frac{1}{2M}\Big(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\Big)^2+e\Phi\end{aligned} \tag{8.6.17}$$

で与えられる．これよりハイゼンベルクの運動方程式は

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{A}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}),H\right]=(\boldsymbol{A},H) \tag{8.6.18}$$

と対称化されたポアソン括弧で表される．なぜならば $\boldsymbol{A}$ は $\boldsymbol{p}$ に依存せず，H は $\boldsymbol{p}$ に関して2次式であるからである．したがって

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{A}=\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial\boldsymbol{r}}\cdot\frac{\partial H}{\partial\boldsymbol{p}}=\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\nabla A} \tag{8.6.19}$$

となり，式(8.6.16)の第2行目は消えてしまい，力の方程式

$$M\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t^2} = e\boldsymbol{E} + \frac{e}{c}\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{B}$$

$$\text{ただし}\ \boldsymbol{E} = -\boldsymbol{\nabla}\Phi \quad \text{および}\ \boldsymbol{B} = \boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A} \tag{8.6.20}$$

を得る．この結果はベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A}$ から作られた磁場 $\boldsymbol{B}$ の力学的な作用を表している．ローレンツ*力が式(8.6.20)に現れたことにより，磁場を導入する方法を見出したことがわかる．すなわちハミルトニアン(8.6.10)を含むラグランジアン(8.6.4)は，電場と磁場の両方の影響下にある荷電粒子を適切に記述する．

ここで一様な磁場 $\boldsymbol{B}$ に関心興味を向けよう．このとき $\boldsymbol{A}$ は何だろうか？ その答えは一意的ではない．もし $\boldsymbol{A}$ がこの磁場を与えるポテンシャルであれば，任意の関数を λ として $\boldsymbol{A}+\boldsymbol{\nabla}\lambda$ もまた同じ磁場を与える．なぜなら

$$\boldsymbol{\nabla}\times(\boldsymbol{A}+\boldsymbol{\nabla}\lambda) = \boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A} = \boldsymbol{B} \tag{8.6.21}$$

が成り立つからである．これはゲージ変換の自由度である．例として $\boldsymbol{B}$ が z 方向を向いているとすると，

$$\begin{aligned} B_x &= \frac{\partial}{\partial y}A_z - \frac{\partial}{\partial z}A_y = 0\,, \\ B_y &= \frac{\partial}{\partial z}A_x - \frac{\partial}{\partial x}A_z = 0\,, \\ B_z &= \frac{\partial}{\partial x}A_y - \frac{\partial}{\partial y}A_x = B \end{aligned} \tag{8.6.22}$$

となる．これらの式の1つの単純な解は

$$A_x = A_z = 0\,, \quad A_y = Bx \tag{8.6.23}$$

であり，別の解は

$$A_y = A_z = 0\,, \quad A_x = -By \tag{8.6.24}$$

である．3番目の解はこれら2つの解の平均

$$A_z = 0\,,\ A_x = -\frac{1}{2}By\,,\ A_y = \frac{1}{2}Bx\ :\quad \boldsymbol{A} = \frac{1}{2}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r} \tag{8.6.25}$$

であり，3次元的で特定の方向(x または y 方向)を選び出していないという点で最も自然である．最初の2つの解は

$$\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r} + \boldsymbol{\nabla}\left(\pm\frac{1}{2}Bxy\right) \tag{8.6.26}$$

と表される．自然な3番目の表示をハミルトニアン(8.6.17)に代入すると

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2M}\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{2c}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}\right)^2 + e\Phi \\ &= \frac{\boldsymbol{p}^2}{2M} + e\Phi - \frac{e}{2Mc}\boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p} + \frac{e^2}{8Mc^2}(\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r})^2 \end{aligned} \tag{8.6.27}$$

*Hendrik Antoon Lorentz (1853–1929)

となる．$\boldsymbol{B}$ に線形な項は軌道角運動量 $\boldsymbol{L}=\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}$ に比例することに注意しよう．

この結果を水素様原子に応用する．荷電粒子は電子であるから，$e\to -e$ と置き換える．ここで $e>0$ は式(8.1.18)で与えた素電荷を表している．これから原子核のクーロン場と z 軸方向に向いた弱い電場とともに，同じ z 方向に向いた弱い磁場を考えることにする．2 次の $\boldsymbol{B}$ を含む項を無視すると，ハミルトニアンは

$$H=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2M}-\frac{Ze^2}{r}+eFz+\frac{e}{2Mc}BL_z \tag{8.6.28}$$

となる．これは簡単である！ **磁気量子数** m で特定される任意の状態では $L'_z=m\hbar$ となるから，正常ゼーマン*効果のエネルギーシフトとして知られているエネルギー

$$\frac{e\hbar}{2Mc}mB=m\mu_0B \tag{8.6.29}$$

が単に加わるだけである．ここで

$$\mu_0=\frac{e\hbar}{2Mc}=5.788\,382\times10^{-9}\,\mathrm{eV\,G^{-1}} \tag{8.6.30}$$

は，ボーア磁子と呼ばれている．前の節の結果と合わせると，弱い平行な電場と磁場中のエネルギー値は

$$E=-\frac{Z^2e^2}{2a_0n^2}+\frac{3}{2}\frac{ea_0}{Z}Fn(k_1-k_2)+m\mu_0B \tag{8.6.31}$$

となる．一定の k_1-k_2 の値で表される電気的に縮退したエネルギー固有値は，式(8.4.21)によれば

$$|m|=\underbrace{(n-1+k_1-k_2)}_{\text{与えられている}}-2k_1 \tag{8.6.32}$$

と書かれ，異なった $|m|$ の値を一般に持つ．そして与えられた $|m|$ の値で異なった符号の m がある．したがって縮退は完全に取り除かれた．

8.7　一様磁場中の電荷(補足)

この節では磁場 $\boldsymbol{B}$ だけを考慮し，式(8.6.17)で $\Phi=0$ とする．するとハミルトニアンは

$$H=\frac{1}{2}M\boldsymbol{v}^2=\frac{1}{2M}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 \quad \text{ただし}\quad \boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}=B\boldsymbol{e}_z \tag{8.7.1}$$

となる．最初に $\boldsymbol{v}=M^{-1}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)$ の交換関係を調べると

*Pieter ZEEMAN (1865–1943)

$$\begin{aligned}\boldsymbol{v}\times\boldsymbol{v} &= \frac{1}{M^2}\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\times\left(\boldsymbol{p}-\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\\ &= -\frac{1}{M^2}\frac{e}{c}\left(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{A}+\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{p}\right)\\ &= \frac{\mathrm{i}\hbar}{M^2}\frac{e}{c}\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A}=\frac{\mathrm{i}\hbar e}{M^2 c}\boldsymbol{B}\end{aligned}\tag{8.7.2}$$

となる．各成分で表すと

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[v_x,v_y]=\frac{e}{M^2c}B\,,\quad \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[v_x,v_z]=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[v_y,v_z]=0\tag{8.7.3}$$

となり，これよりハミルトニアンは

$$H=\underbrace{\tfrac{1}{2}Mv_z^2}_{=p_z^2/(2M)}+\tfrac{1}{2}M\left(v_x^2+v_y^2\right)\tag{8.7.4}$$

と $(1+2)$-次元に分離する．電子に対しては $e=-|e|$ であるから，変数 q,p を

$$v_x=\sqrt{\frac{\hbar|e|B}{M^2c}}\,p\,,\qquad v_y=\sqrt{\frac{\hbar|e|B}{M^2c}}\,q\tag{8.7.5}$$

により導入すると

$$\frac{1}{\mathrm{i}}[q,p]=1\tag{8.7.6}$$

となり，したがって

$$H=\frac{p_z^2}{2M}+\frac{|e|\hbar B}{Mc}\frac{1}{2}\left(p^2+q^2\right)\tag{8.7.7}$$

はエネルギースペクトル

$$E=\frac{{p'_z}^2}{2M}+\underbrace{\frac{|e|\hbar B}{Mc}}_{=\hbar\omega_1}\left(n+\tfrac{1}{2}\right)$$

$$\text{ただし}\quad -\infty<p'_z<\infty\,,\qquad n=0,1,2,\ldots\tag{8.7.8}$$

を与える．$\omega_1=|e|B/(Mc)$ はサイクロトロン振動数と呼ばれ，x,y 平面での $\boldsymbol{v}$ の回転振動数である．実際，次の2つの式

$$\frac{\mathrm{d}v_x}{\mathrm{d}t}=-\omega_1 v_y\,,\quad \frac{\mathrm{d}v_y}{\mathrm{d}t}=\omega_1 v_x\tag{8.7.9}$$

はちょうど

$$\frac{\mathrm{d}q}{\mathrm{d}t}=\omega_1 p\,,\quad \frac{\mathrm{d}p}{\mathrm{d}t}=-\omega_1 q\tag{8.7.10}$$

となり，これより上記のエネルギースペクトルが理解できる．もちろんこれらの式は，式(8.6.20)より

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}=-\frac{e}{Mc}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v}=\frac{|e|}{Mc}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{v}\tag{8.7.11}$$

であり以前から知っていたことである．

自由な z 方向の運動を除くと，または $p_z' = 0$ とするとエネルギーは 1 次元振動子のエネルギーである．このエネルギー状態の多重度は何であろうか？ これまでと異なった特殊なゲージ $A_y = Bx$ を用いると明快な描像を得ることができる．このときハミルトニアンは

$$H = \frac{p_x^2}{2M} + \frac{1}{2M}\left(p_y - \frac{e}{c}Bx\right)^2 \tag{8.7.12}$$

となり，この中に y が現れないことに注意すると運動方程式は

$$\frac{\mathrm{d}p_y}{\mathrm{d}t} = -\frac{\partial H}{\partial y} = 0 \tag{8.7.13}$$

となり，状態は p_y の固有値 p_y' で記述される．したがってハミルトニアンは

$$H \to \frac{p_x^2}{2M} + \frac{M\omega_1^2}{2}\left(x - \frac{c}{eB}p_y'\right)^2 \quad \text{ただし} \quad -\infty < p_y' < \infty \tag{8.7.14}$$

となり，1 次元振動子に帰着したことを示している．エネルギーは p_y' に独立であるから，各エネルギー状態は無限に縮退していることは明らかである．

この縮退の問題は $\boldsymbol{A} = \frac{1}{2}\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{r}$ を用いた場合どのように解決されるであろうか？ このゲージでのハミルトニアンは次の式で与えられる．

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2M}\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{2c}\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{r}\right)^2 = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2M} - \frac{e}{2Mc}\boldsymbol{B} \cdot \boldsymbol{L} + \frac{e^2}{8Mc^2}(\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{r})^2 \\ &= \underbrace{\frac{1}{2M}}_{\uparrow\; p_z' = 0}\left(p_x^2 + p_y^2\right) + \underbrace{\frac{|e|}{2Mc}B}_{=\omega_2} L_z + \underbrace{\frac{e^2B^2}{8Mc^2}}_{=\frac{1}{2}M\omega_2^2}\left(x^2 + y^2\right) . \end{aligned} \tag{8.7.15}$$

ただし $\omega_2 = \frac{1}{2}\omega_1$ である．この表現から，系が付加的なエネルギー項 $\omega_2 L_z$ を持った 2 次元振動子と見なせることがわかる．ここで量子数 $(y_+^\dagger y_+)' = n_+ = 0, 1, 2, \ldots$ および $(y_-^\dagger y_-)' = n_- = 0, 1, 2, \ldots$ を用いると便利である．なぜなら式(7.4.17)ですでに見たように，$\omega_2 L_z' = \hbar\omega_2(n_+ - n_-)$ となるからである．したがって固有値は

$$\begin{aligned} E &= \hbar\omega_2(n_+ + n_- + 1) + \hbar\omega_2(n_+ - n_-) \\ &= \hbar\omega_2(2n_+ + 1) = \hbar\omega_1\left(n_+ + \tfrac{1}{2}\right) \end{aligned} \tag{8.7.16}$$

となる．この結果は $e = -|e| < 0$ に適用される．一方，$e = |e| > 0$ では $E = \hbar\omega_1(n_- + \frac{1}{2})$ となる．縮退はエネルギーが整数 n_+, n_- のどちらか一方にのみ依存することに起因する．

この縮退をもっと物理的に記述するためにまず注意するべきことは，運動方程式(8.7.11)は

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(-\frac{e}{Mc}\boldsymbol{B} \times \boldsymbol{r}\right) \tag{8.7.17}$$

と表され，したがって $\boldsymbol{r}_0$ を

$$\boldsymbol{v}+\frac{e}{Mc}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}\equiv\frac{e}{Mc}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}_0 \tag{8.7.18}$$

と定義すると，$\mathrm{d}\boldsymbol{r}_0/\mathrm{d}t=0$ を満たすことである．確かに

$$\boldsymbol{v}=-\frac{e}{Mc}\boldsymbol{B}\times(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0) \tag{8.7.19}$$

は，固定点 $\boldsymbol{r}_0$ の周りを振動数 ω_1 で回転する運動を記述している．どのような性質を $\boldsymbol{r}_0\mathrel{\widehat{=}}(x_0,y_0)$ は持っているだろうか？ それを調べるために最初に

$$\frac{e}{c}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}_0=\underbrace{M\boldsymbol{v}}_{\boldsymbol{p}-(e/c)\boldsymbol{A}=}+\frac{e}{c}\underbrace{\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}}_{=2\boldsymbol{A}}=\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A} \tag{8.7.20}$$

となることに注意しよう．成分で表すと

$$p_x-\frac{e}{2c}By=-\frac{eB}{c}y_0\,,\quad p_y+\frac{e}{2c}Bx=\frac{eB}{c}x_0 \tag{8.7.21}$$

であり，それらの間の交換関係は

$$\left(\frac{eB}{c}\right)^2[x_0,y_0]=\left[p_x-\frac{e}{2c}By,p_y+\frac{e}{2c}Bx\right]=-\mathrm{i}\hbar\frac{e}{c}B \tag{8.7.22}$$

すなわち

$$[x_0,y_0]=-\mathrm{i}\hbar\frac{c}{eB}\underset{\overbrace{e=-|e|}}{\overset{}{\underset{\uparrow}{=}}}\frac{\mathrm{i}\hbar}{M\omega_1} \tag{8.7.23}$$

となり x_0 と y_0 は互いに交換しないから，運動の中心を正確に記述することは不可能であると結論される．これらはハイゼンベルクの不確定性関係

$$\delta x_0\,\delta y_0\geq\frac{1}{2}\frac{\hbar}{M\omega_1} \tag{8.7.24}$$

にしたがう．さらに

$$\begin{aligned}\frac{1}{2M}\left(\boldsymbol{p}+\frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2&=\underbrace{\frac{1}{2M}\left(\frac{eB}{c}\right)^2}_{=\frac{1}{2}M\omega_1^2}\underbrace{(x_0^2+y_0^2)}_{=r_0^2}\\&=\frac{1}{2M}\left(p_x^2+p_y^2\right)-\underbrace{\frac{|e|}{2Mc}B}_{=\omega_2}L_z+\underbrace{\frac{e^2B^2}{8Mc^2}}_{=\frac{1}{2}M\omega_2^2}\left(x^2+y^2\right)\end{aligned} \tag{8.7.25}$$

であるから，

$$\frac{1}{2}M\omega_1^2r_0^2=\frac{1}{2M}\left(p_x^2+p_y^2\right)+\frac{1}{2}M\omega_2^2\left(x^2+y^2\right)-\omega_2L_z \tag{8.7.26}$$

と表され，したがってこの固有値は

$$\frac{1}{2}M\omega_1^2 r_0^{2\prime} = \hbar\omega_2(n_+ + n_- + 1) - \hbar\omega_2(n_+ - n_-)$$
$$= \hbar\omega_1\left(n_- + \tfrac{1}{2}\right) \qquad (8.7.27)$$

となる．このように式(8.7.16)のエネルギーには現れなかった2番目の量子数は，原点から軌道の中心に至る距離を

$$r_0^{2\prime} = 2\frac{\hbar}{M\omega_1}\left(n_- + \tfrac{1}{2}\right) \qquad (8.7.28)$$

と規定するものであった．もちろんこの結果は式(8.7.23)から明らかであって，$x_0^2 + y_0^2$ の固有値は適切にスケールされた振動子の固有値に一致している．

ところで E も同様に表すことができて，

$$H = \frac{1}{2}M\boldsymbol{v}^2 = \frac{M}{2}\left[-\frac{e}{Mc}\boldsymbol{B}\times(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)\right]^2 = \frac{M}{2}\omega_1^2(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)^2 \qquad (8.7.29)$$

となり，式(8.7.16)と比較すると

$$(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0)^{2\prime} = 2\frac{\hbar}{M\omega_1}\left(n_+ + \tfrac{1}{2}\right) \qquad (8.7.30)$$

を得る．

エネルギーの縮退は，単に運動の中心が正確には特定できずにどこにでも存在できるということを意味していることは，これまでの長い導出の過程ですでに明らかであった．この縮退に関連して色々の選択肢がある．その1つは，r_0^2 の値を特定するが，その円の中心の位置は知ることができないか，または，たとえば x_0 は特定できるが(それがゲージ $A_y = Bx$ である)，しかし y_0 は知ることができないか，または最も物理的な選択肢として，$x_0 + \mathrm{i}y_0$ の固有ベクトルすなわち最小不確定な状態を用いることなどがある．この最後の例を用いると以下の実用的な問題の解答を容易に得ることができる．それは有限の(巨視的な)面積 A の領域に系が限定されているならば，与えられたエネルギーでどれだけの数の状態が存在するか？という問題である．それには位相空間の積分

$$\int\frac{\mathrm{d}q'\,\mathrm{d}p'}{2\pi\hbar} \qquad (8.7.31)$$

が状態数を与えることを思い起こそう．式(8.7.23)から対応関係

$$q \to \sqrt{M\omega_1}\,x_0\,,\quad p \to \sqrt{M\omega_1}\,y_0 \qquad (8.7.32)$$

を得るから，したがって

$$\int\frac{\mathrm{d}q'\,\mathrm{d}p'}{2\pi\hbar} \longrightarrow \frac{M\omega_1}{2\pi\hbar}\int\mathrm{d}x_0'\,\mathrm{d}y_0' = \frac{|e|B}{2\pi\hbar c}A \qquad (8.7.33)$$

が求める数である．別のもっと特殊な求め方は領域を円とすることである．すると，最も大きな半径と最も大きな n_- は

$$\frac{1}{\pi}A = r_0^{2\prime}\Big|_{\max} \cong 2\frac{\hbar}{M\omega_1}n_{-,\max} \qquad (8.7.34)$$

で関係しているから，

$$\text{状態数} = n_{-,\max} = \frac{M\omega_1}{\hbar}\frac{A}{2\pi} \tag{8.7.35}$$

を得る．

8.8　散乱状態

未完のクーロン問題に戻ることにしよう．未完であるとは，これまで $E<0$ の状態すなわち束縛状態のみを考えていたからである．では $E>0$ の状態とはどんなものだろうか？ このような状態は，正の運動エネルギー $\frac{1}{2}M\boldsymbol{v}^2 = \boldsymbol{p}^2/(2M)$ と無視できるほど小さなポテンシャルエネルギー $-Ze^2/r \to 0$ を持って，はるか遠方からやって来る束縛されていない電子を記述する．原子核に近づくこのような粒子は，その方向を変えつつやがて原子核からしだいに遠ざかる．すなわち散乱される．

遠くにいる粒子が速度 $v = p/M$ で z 軸に沿って動いていると仮定する．その波動関数は本質的には平面波

$$\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}} = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}pz} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} \quad \text{ただし}\ k = \frac{p}{\hbar} = \frac{Mv}{\hbar} \tag{8.8.1}$$

であるだろう．波が原点に位置する力の中心に近づくと，実質的に原点の近傍から発する散乱された粒子を表す新しい波であって遠くからは**球面**波 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}$ と見える波を作り出す．

2つの波の成分は大まかにいって $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}$ と $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}$ であり，放物線座標では

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}k(\xi-\eta)}, \quad \mathrm{e}^{\mathrm{i}k(\xi+\eta)} \tag{8.8.2}$$

の形をしている．このことから完全な波動関数は

$$\psi = \mathrm{e}^{\mathrm{i}k\xi}G(\eta) \tag{8.8.3}$$

と表されるだろうと推測できる．もちろん物理的な状況は軸対称性を持つから波動関数は ϕ によらない．式(8.4.9)に代入し $2ME/\hbar^2 = k^2$, $\partial\psi/\partial\phi = 0$ を用いると

$$\Bigg[\underbrace{\frac{\partial}{\partial\xi}\xi\frac{\partial}{\partial\xi}}_{\to -k^2\xi + \mathrm{i}k} + k^2\xi + \frac{\partial}{\partial\eta}\eta\frac{\partial}{\partial\eta} + k^2\eta + \frac{2Z}{a_0}\Bigg]\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\xi}G(\eta) = 0 \tag{8.8.4}$$

であるから

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\eta^2} + \frac{1}{\eta}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\eta} + k^2 + \frac{2Z/a_0 + \mathrm{i}k}{\eta}\right]G(\eta) = 0 \tag{8.8.5}$$

となり，ここで $G = \sqrt{1/\eta}\,u(\eta)$ とすると

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}\eta^2} + \frac{1}{4\eta^2} + k^2 + \frac{2Z/a_0 + \mathrm{i}k}{\eta}\right]u(\eta) = 0 \tag{8.8.6}$$

を得る．この式と類似の動径方程式

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}+\frac{1}{4r^2}-\kappa^2+\frac{2Z}{a_0 r}\right]u(r)=0 \tag{8.8.7}$$

は，式(8.1.8)で $l=-\frac{1}{2}$，$\left(2M/\hbar^2\right)V(r)=-2Z/(a_0 r)$ および $2ME/\hbar^2=-\kappa^2$，$\kappa=Z/(na_0)$ としたものであり，束縛状態の解(式(8.1.32)を参照)

$$u(r)\propto r^{\frac{1}{2}}\mathrm{L}^{(0)}_{Z/(\kappa a_0)-\frac{1}{2}}(2\kappa r)\,\mathrm{e}^{-\kappa r} \tag{8.8.8}$$

を持つ．これらの間には対応関係

$$r\to\eta\,,\quad Z\to Z+\tfrac{1}{2}\mathrm{i}ka_0\,,\quad \kappa\to\mathrm{i}k \tag{8.8.9}$$

が存在する．したがって対応する解は

$$u(\eta)\propto \eta^{\frac{1}{2}}\mathrm{L}^{(0)}_{-\mathrm{i}Z/(ka_0)}(2\mathrm{i}k\eta)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\eta} \tag{8.8.10}$$

であるから

$$G(\eta)\propto \mathrm{L}_{-\mathrm{i}\beta}(2\mathrm{i}k\eta)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\eta} \tag{8.8.11}$$

を得る．ここで

$$\beta=\frac{Z}{ka_0}=\frac{Ze^2M}{k\hbar^2}=\frac{Ze^2M}{\hbar p}=\frac{Ze^2}{Mv^2}k=\frac{Ze^2}{\hbar v} \tag{8.8.12}$$

と表した．対応 $\kappa\to\mathrm{i}k$ における i の符号は当然

$$G(\eta)\propto \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\eta}\qquad (Z\to 0)\quad \left[\text{すなわち } \mathrm{L}^{(0)}_{-\mathrm{i}Z/(ka_0)}\to \mathrm{L}^{(0)}_0=1\right] \tag{8.8.13}$$

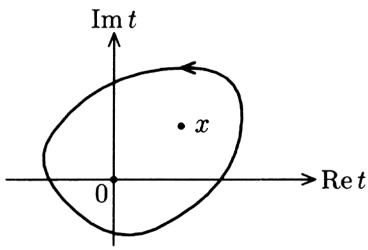
となるように選ばれていることに注意しよう．これまではすべてがうまく行っているが，この対応で現れるラゲールの多項式の複素次数への拡張とは何だろうか？

まず整数 ν での定義

$$\mathrm{L}^{(0)}_\nu(x)=\frac{1}{\nu!}\mathrm{e}^x\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\right)^\nu x^\nu\,\mathrm{e}^{-x} \tag{8.8.14}$$

を思い起こそう．この関数を線積分による表示

$$\mathrm{L}^{(0)}_\nu(x)=\mathrm{e}^x\oint\frac{\mathrm{d}t}{2\pi\mathrm{i}}\frac{t^\nu\,\mathrm{e}^{-t}}{(t-x)^{\nu+1}} \tag{8.8.15}$$

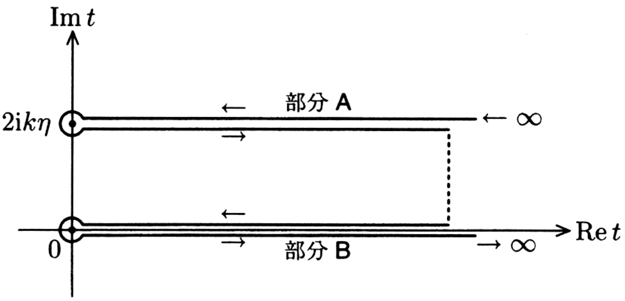


を用いて非整数の ν へと拡張することができる．この複素積分において，非整数の ν で

はカットは $t=x$ と $t=0$ を結ばなくてはならない．そこで $\nu=-\mathrm{i}\beta$ および $x=2\mathrm{i}k\eta$ を代入し次の式を得る．

$$\mathrm{L}^{(0)}_{-\mathrm{i}\beta}(2\mathrm{i}k\eta)=\mathrm{e}^{2\mathrm{i}k\eta}\oint\frac{\mathrm{d}t}{2\pi\mathrm{i}}\,\mathrm{e}^{-t}t^{-\mathrm{i}\beta}\frac{1}{(t-2\mathrm{i}k\eta)^{1-\mathrm{i}\beta}}\,. \tag{8.8.16}$$

積分経路を採用する便利な方法は，カットを $t=2\mathrm{i}k\eta$ から $t=2\mathrm{i}k\eta+\infty$ へ，そして次に $t=\infty$ から $t=0$ へ延長することである．すると，カットに沿っての積分は下図に示すように2つの部分A，Bに分かれる．



(8.8.17)

Aの部分では $t=2\mathrm{i}k\eta+u$ とおくと u は $\infty\to0\to\infty$ と動き，$k\eta\gg1$ として積分を評価すると

$$\begin{aligned}\Big[\mathrm{L}^{(0)}_{-\mathrm{i}\beta}(2\mathrm{i}k\eta)\Big]_{\mathrm{A}}&=\int\frac{\mathrm{d}u}{2\pi\mathrm{i}}\,\mathrm{e}^{-u}(2\mathrm{i}k\eta+u)^{-\mathrm{i}\beta}\frac{1}{u^{1-\mathrm{i}\beta}}\\&\underset{\underbrace{k\eta\gg1}}{\overset{}{\cong}}\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta\log(2\mathrm{i}k\eta)}\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\left[\int_{\infty}^{0}\mathrm{d}u\,\frac{\mathrm{e}^{-u}}{u^{1-\mathrm{i}\beta}}+\int_0^{\infty}\mathrm{d}u\,\frac{\mathrm{e}^{-u}}{\left(\mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}}u\right)^{1-\mathrm{i}\beta}}\right]\\&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta[\frac{\mathrm{i}\pi}{2}+\log(2k\eta)]}\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\left(\mathrm{e}^{-2\pi\beta}-1\right)\underbrace{\int_0^{\infty}\mathrm{d}u\,u^{-1+\mathrm{i}\beta}\,\mathrm{e}^{-u}}_{=(-1+\mathrm{i}\beta)!}\\&=\mathrm{e}^{\frac{\pi\beta}{2}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta\log(2k\eta)}\,(\mathrm{i}\beta)!\,\frac{1-\mathrm{e}^{-2\pi\beta}}{2\pi\beta}\end{aligned} \tag{8.8.18}$$

となり，Bの部分については

$$\begin{aligned}\Big[\mathrm{L}^{(0)}_{-\mathrm{i}\beta}(2\mathrm{i}k\eta)\Big]_{\mathrm{B}}&\cong\frac{\mathrm{e}^{2\mathrm{i}k\eta}}{\left(\mathrm{e}^{\frac{3\pi\mathrm{i}}{2}}2k\eta\right)^{1-\mathrm{i}\beta}}\frac{1}{2\pi\mathrm{i}}\underbrace{\left[\int_{\infty}^{0}\mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{-t}t^{-\mathrm{i}\beta}+\mathrm{e}^{2\pi\beta}\int_0^{\infty}\mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{-t}t^{-\mathrm{i}\beta}\right]}_{=\left(\mathrm{e}^{2\pi\beta}-1\right)(-\mathrm{i}\beta)!}\\&=\frac{\beta\,\mathrm{e}^{2\mathrm{i}k\eta}}{2k\eta}\,\mathrm{e}^{-\frac{3\pi}{2}\beta}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta\log(2k\eta)}\,\frac{\mathrm{e}^{2\pi\beta}-1}{2\pi\beta}(-\mathrm{i}\beta)!\end{aligned} \tag{8.8.19}$$

となることがわかり，この2つの寄与を加えると次の式を得る．

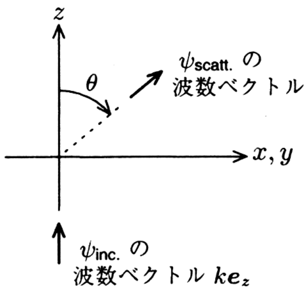
$$\mathrm{L}^{(0)}_{-\mathrm{i}\beta}(2\mathrm{i}k\eta) = \left[\mathrm{L}^{(0)}_{-\mathrm{i}\beta}(2\mathrm{i}k\eta)\right]_{\mathrm{A}} + \left[\mathrm{L}^{(0)}_{-\mathrm{i}\beta}(2\mathrm{i}k\eta)\right]_{\mathrm{B}}$$
$$\cong \mathrm{e}^{-\frac{3\pi}{2}\beta}\frac{\mathrm{e}^{2\pi\beta}-1}{2\pi\beta}(\mathrm{i}\beta)!\left[\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta\log(2k\eta)} + \beta\frac{\mathrm{e}^{2\mathrm{i}k\eta}}{2k\eta}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta\log(2k\eta)}\frac{(-\mathrm{i}\beta)!}{(\mathrm{i}\beta)!}\right] . \tag{8.8.20}$$

もし η 依存の前因子を除けば，$k\eta \gg 1$ の場合には関数 G は次のように分解される．

$$G \propto \underbrace{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\eta}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta\log(2k\eta)}}_{\text{入射(incident)}} + \underbrace{\beta\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}k\eta}}{2k\eta}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta\log(2k\eta)}\,\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\arg((\mathrm{i}\beta)!)}}_{\text{散乱(scattered)}}$$
$$= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}k\xi}\left(\psi_{\mathrm{inc.}} + \psi_{\mathrm{scatt.}}\right) . \tag{8.8.21}$$

散乱角 θ を下図のように導入すると変数の関係は

$$\begin{aligned} z &= r\cos\theta , \\ \eta &= \tfrac{1}{2}(r-z) \\ &= r\sin^2\tfrac{1}{2}\theta \end{aligned} \tag{8.8.22}$$



となる．すると入射振幅と散乱振幅は

$$\psi_{\mathrm{inc.}} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta\log\left(2kr\sin^2(\frac{1}{2}\theta)\right)} ,$$
$$\psi_{\mathrm{scatt.}} = \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}\frac{\beta}{2k\sin^2(\frac{1}{2}\theta)}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta\log\left(2kr\sin^2(\frac{1}{2}\theta)\right)}\,\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\arg((\mathrm{i}\beta)!)} \tag{8.8.23}$$

と表される．入射粒子は最初は単に $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}$ で表されると予想していたが，実際にはゆっくりと減少するクーロンポテンシャルの長距離効果を感じていることに注意しよう．このことは散乱された粒子を表す外向きの球面波についても同じように成り立っている．

漸近形 $\psi = \psi_{\mathrm{inc.}} + \psi_{\mathrm{scatt.}}$ から入射粒子と散乱粒子の相対確率密度は

$$|\psi_{\mathrm{inc.}}|^2 = 1 , \quad |\psi_{\mathrm{scatt.}}|^2 = \frac{1}{r^2}\left[\frac{\beta}{2k\sin^2(\frac{1}{2}\theta)}\right]^2 \tag{8.8.24}$$

と同定される．漸近的な速度が同じであるから，これらはまた相対的な流束(= 密度 × 速さ)でもある．すなわち散乱で変化するものは方向である．通常用いる用語は単位立体角当たりの微分散乱断面積 $\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega$ であり，$\mathrm{d}\sigma$ は立体角 $\mathrm{d}\Omega$ に散乱される流束と入射流束の比であるから

$$\mathrm{d}\sigma = \frac{|\psi_{\text{scatt.}}|^2 r^2 \mathrm{d}\Omega}{|\psi_{\text{inc.}}|^2} = \mathrm{d}\Omega \left[\frac{\beta}{2k\sin^2(\frac{1}{2}\theta)}\right]^2 \tag{8.8.25}$$

となる．ここで $\beta/k = Ze^2/(Mv^2)$ を代入して

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \left(\frac{Ze^2}{2Mv^2}\right)^2 \frac{1}{\sin^4(\frac{1}{2}\theta)} \tag{8.8.26}$$

を得る．この結果は $\hbar$ に依存せず，古典的なラザフォード*の散乱断面積と一致する．

問題

8-1a　1次元振動子で無次元変数について：たとえば $\langle q^4 \rangle_n$ はベクトル $q^2|n\rangle$ の長さの2乗であることなどに注意して，

$$\left\langle q^4 \right\rangle_n, \quad \left\langle p^4 \right\rangle_n, \quad \left\langle q^2 \cdot p^2 \right\rangle_n$$

を求めよ．これらの独立に計算した結果を用いて

$$\left\langle \left(\frac{q^2+p^2}{2}\right)^2 \right\rangle_n$$

を求めて正しさを検証せよ．

8-1b　このような計算のもっと一般的な例として式

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\sqrt{2}\,\lambda q} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda y^\dagger}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\lambda y}\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\lambda^2}$$

を証明せよ．さらに

$$y^k|n\rangle = |n-k\rangle \sqrt{\frac{n!}{(n-k)!}}$$

を思い起こせ(示せばなおよい)．次に

$$\left\langle \mathrm{e}^{\mathrm{i}\sqrt{2}\,\lambda q} \right\rangle_n = \mathrm{L}_n^{(0)}(\lambda^2)\,\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\lambda^2}$$

を導け．λ 展開の最初の数項を用いて $\langle q^2 \rangle_n$ および $\langle q^4 \rangle_n$ を求めよ．$\langle q^6 \rangle_n$ を求めることができるか？

8-1c　2次元振動子で，無次元変数を使用して期待値 $\langle \rho^4 \rangle_{n_+,n_-}$ を求め，それを N と m で表せ．

8-1d　3次元クーロン $u(r)$ と2次元振動子 $u(\rho)$ の対応を用いて，

$$\langle r \rangle_{n,l} = \frac{na_0}{2Z} \frac{\langle \rho^4 \rangle_{n_+,n_-}}{\langle \rho^2 \rangle_{n_+,n_-}}$$

---

*Lord Ernest RUTHERFORD, Baron of Nelson (1871–1937)

を示せ．すでに知っている振動子の値と，この 2 つの系の関連性を応用して次の式を示せ．

$$\langle r\rangle_{n,l} = \frac{a_0}{2Z}\left[3n^2 - l(l+1)\right].$$

8-2 2 次元振動子について：$y_\pm = 2^{-\frac{1}{2}}(y_1 \mp \mathrm{i}y_2)$ によって導入した y_+ および y_- を用いて，$\rho^2 = q_1^2 + q_2^2$ を表し，式(8.1.28)を再導出せよ．

8-3 2 次元クーロン問題はハミルトニアン

$$H = \frac{1}{2M}\left(p_x^2 + p_y^2\right) - \frac{Ze^2}{\sqrt{x^2+y^2}}$$

で定義される．エネルギー固有値とその多重度を求めよ．

8-4 磁場中のスピンを持つ電子(電荷 $e = -|e|$)に対する非相対論的ハミルトニアンは(非常によい近似で)

$$H = \frac{1}{2M}\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)^2 - \frac{e\hbar}{2Mc}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}$$

で与えられる．これは

$$H = \frac{1}{2M}\left[\boldsymbol{\sigma}\cdot\left(\boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}\right)\right]^2$$

であることを証明せよ．z 軸に沿った一様な場を考える．$(p_z - \frac{e}{c}A_z)' = 0$ の状況下で基底状態のエネルギー固有値は何か？ もっと一般に $(p_z - \frac{e}{c}A_z)' = \hbar k$ の場合に，エネルギー固有値は何か？（それらはランダウ*準位と呼ばれる）．

8-5 自由粒子では，運動量 $\boldsymbol{p}$ と相対論的エネルギー $W = Mc^2 + E$ は

$$W^2 = \boldsymbol{p}^2c^2 + (Mc^2)^2$$

であり，書き換えて

$$E = W - Mc^2 = \frac{\boldsymbol{p}^2c^2}{W + Mc^2} = \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\frac{1}{2M + E/c^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}$$

とする(ここで $\boldsymbol{p} \to \boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}$ によって磁場を導入し非相対論的極限をとれば，問題 8-4 と関連することに注意せよ)．エネルギー E の状態でのハミルトニアンに対する，近似的な相対論的補正を求めるために，静電エネルギー V を $E \to E - V$ で置き換えて導入すると

$$\begin{aligned} H &= \boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}\frac{1}{2M + (E-V)/c^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} + V \\ &\cong \frac{\boldsymbol{p}^2}{2M} + V - \frac{1}{4M^2c^2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p}(E-V)\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{p} \end{aligned}$$

---

*Lev Davidovich LANDAU (1908–1968)

に達する．この補正項が水素様原子の基底状態に対して生じるエネルギーシフトは何か？

8-6a　ポテンシャル $V(r)$ 中を運動するスピンを持たない粒子の 3 次元の相対論的シュレーディンガー方程式は

$$\left[(E-V)^2 - c^2\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\boldsymbol{\nabla}\right)^2 - \left(Mc^2\right)^2\right]\psi = 0$$

である．$V = -Ze^2/r$ を代入し束縛状態エネルギーを求めよ(比較法を用いることを提案する)．

8-6b　問題 8-6a に対する近似的手続きとして，$E = Mc^2 + \mathcal{E}$, $|\mathcal{E}| \ll Mc^2$ から始めて，修正されたシュレーディンガー方程式

$$\left[\mathcal{E} - V - \frac{1}{2M}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\boldsymbol{\nabla}\right)^2 + \frac{(\mathcal{E}-V)^2}{2Mc^2}\right]\psi = 0$$

に達する．1 次の摂動論を用いて近似的エネルギーシフトを求めよ．それが問題 8-6a で得たものの近似に実際なっているかどうか確かめよ．

8-7a　$\boldsymbol{p}^2/(2M)$ は

$$c\sqrt{\boldsymbol{p}^2 + (Mc)^2} - Mc^2$$

を $\boldsymbol{p}^2$ のベキについて展開した式の主要項と見なすことができる．この展開の次の項はハミルトニアンに対して補正

$$\Delta H = -\frac{1}{4}\alpha^2 R_\infty \left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{(\hbar/a_0)}\right)^2$$

を生じることを示せ．ここで，$\alpha = e^2/(\hbar c) \cong 1/137$ はゾンマーフェルト*の微細構造定数である．

8-7b　1 次の摂動論を用いて，基底状態のエネルギーシフトを求めよ．この目的のために，$p^4 = (\boldsymbol{p}^2)^2$ の基底状態での期待値を以下に示した様々な方法を用いて求めよ．

$$\begin{aligned}\left\langle p^4\right\rangle &= \int(\mathrm{d}\boldsymbol{p}')\,p'^4|\psi(\boldsymbol{p}')|^2 = \int(\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\,\psi(\boldsymbol{r}')^*\left(\hbar^2\boldsymbol{\nabla}'^2\right)^2\psi(\boldsymbol{r}')\\ &= \int(\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\left|\hbar^2\boldsymbol{\nabla}'^2\psi(\boldsymbol{r}')\right|^2 = \left\langle\left[2M\left(Ze^2/r - Z^2R_\infty\right)\right]^2\right\rangle .\end{aligned}$$

これらの等式を証明せよ．

---

*Arnold SOMMERFELD (1868–1951)

8-8 基底状態の固有ベクトルがしたがう方程式を，問題 8-7b の $\psi(\boldsymbol{p}')$ がしたがう積分方程式として記述せよ．そしてそれが確かにしたがうことを示せ．

8-9a r はその性質から正であるから，式(8.1.8)の動径シュレーディンガー方程式に問題 6-33 の WKB 量子化を直接的に適用することはできない．まず初めに変域が制限されていない変数へうまく変換しなければならない．任意の固定した長さを $r_0>0$ として，変数変換

$$r = r_0\,\mathrm{e}^{x/r_0}\ , \qquad u(r) = \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}x/r_0}\psi(x)$$

を行うと，$u(r)$ に対する規格化積分は $\psi(x)$ の規格化積分に変わり，式(8.1.8)は有効一次元ハミルトニアン

$$H_l(x,p) = \frac{r_0}{r}\frac{p^2}{2M}\frac{r_0}{r} + \frac{\hbar^2(l+\frac{1}{2})^2}{2Mr^2} + V(r) \quad \text{そして} \quad \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\big[x,p\big] = 1$$

による方程式に変わることを示せ．問題 6-35a と同様に，$\mathrm{tr}\,\{\eta(E_{n_r,l}-H_l)\}$ の半古典的な値を $n_r+\frac{1}{2}$ (n_r: 動径量子数)に等しいとすると，

$$n_r + \tfrac{1}{2} = \frac{1}{\pi\hbar}\int \mathrm{d}r\,\sqrt{2ME_{n_r,l} - \hbar^2(l+\tfrac{1}{2})^2/r^2 - 2MV(r)}$$

に達する．式(8.1.8)での $l(l+1)$ から，ここでの $(l+\frac{1}{2})^2$ に移ることをランガー*の補正という．

8-9b これを 3 次元振動子 $V(r)=\frac{1}{2}M\omega^2r^2$ に応用せよ．近似的な WKB エネルギー固有値と厳密な値とを比較検討せよ．

8-9c 3 次元クーロン問題 $V(r)=-Ze^2/r$ で前問と同様な問いに答えよ．

8-9d これらの応用は，最初に次の積分を用いればより簡単になる．そこで，次の式を証明せよ．

$$\int_{r_1}^{r_2}\mathrm{d}r\,\frac{r}{\sqrt{(r_2-r)(r-r_1)}} = \frac{1}{2}\pi(r_1+r_2)\ ,$$

$$\int_{r_1}^{r_2}\frac{\mathrm{d}r}{r}\frac{1}{\sqrt{(r_2-r)(r-r_1)}} = \frac{\pi}{\sqrt{r_1r_2}}\ ,$$

$$\int_{r_1}^{r_2}\frac{\mathrm{d}r}{r}\sqrt{(r_2-r)(r-r_1)} = \frac{1}{2}\pi(r_1+r_2) - \pi\sqrt{r_1r_2}\,.$$

ただし，$r_2>r_1>0$ とする．

8-10 問題 8-9a と同様な議論を用いて，回転対称なポテンシャル $V(x_1,x_2)=V(\rho)$,

---

*Rudolph Ernest LANGER (1894–1968)

$\rho = (x_1^2 + x_2^2)^{\frac{1}{2}}$ 中の2次元運動に対するエネルギー固有値の WKB 近似を求めよ．$V(\rho) = \frac{1}{2}M\omega^2\rho^2$ の場合には，どのような結果を得るか？

8-11　3重水素(^{3}H, $Z = 1$)の原子核である3重陽子(トリトン)は β 崩壊を起こし，生成された電子(および ニュートリノ)は非常に速く脱出する．崩壊前に原子は水素様基底状態にいる．崩壊後に残る ^{3}He$^+$ イオン($Z = 2$)が同じくその基底状態に見出される確率は何か？

8-12　非縮退の2次摂動論：関係式

$$(E - H)\frac{\partial}{\partial\lambda}|E\rangle + \left(\frac{\partial E}{\partial\lambda} - \frac{\partial H}{\partial\lambda}\right)|E\rangle = 0$$

から，

$$\frac{\partial E}{\partial\lambda} = \langle E|\frac{\partial H}{\partial\lambda}|E\rangle$$

および

$$E \neq E' : \qquad \langle E'|\frac{\partial}{\partial\lambda}|E\rangle = \frac{1}{E - E'}\langle E'|\frac{\partial H}{\partial\lambda}|E\rangle$$

が導かれることをすでに知っている．もし

$$\langle E|\frac{\partial}{\partial\lambda}|E\rangle = 0$$

となるように選べば

$$\frac{\partial}{\partial\lambda}\langle E|E\rangle = 0$$

と矛盾はない．$\frac{\partial^2}{\partial\lambda^2}E$ を求め，ハミルトニアン

$$H = H_0 + H_1 = H_0 + \lambda H_1\Big|_{\lambda\,=\,1}$$

の固有値の展開

$$E = E_0 + \frac{\partial E}{\partial\lambda}\Big|_{\lambda\,=\,0} + \frac{1}{2}\frac{\partial^2 E}{\partial\lambda^2}\Big|_{\lambda\,=\,0} + \cdots$$

を用いて摂動展開を書き下せ．これを問題 7-6 の例に適用せよ．

8-13　一般に

$$\left\langle r^{-1}\right\rangle \geq \langle r\rangle^{-1}$$

が成り立つことを証明できるか？ 等号が成り立つのはどんなときか？ 水素様原子ではこの不等式を満足しているか？ n が大きく，しかも $n_r = 0$ の状態について，この不等式の両辺を比べよ．結論は何か？

8-14　式(8.3.4)の生成演算子 G_λ はそのままではエルミートではない．無限小のスケール変化を考える限りでは，このことは問題とならないのはなぜか？ 対称化すると

$$G_\lambda = \delta\lambda\,\tfrac{1}{2}(\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r} + \boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}) = \delta\lambda\,\Gamma$$

となり，エルミートである．有限のスケール変換

$$\boldsymbol{r} \rightarrow \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\lambda\Gamma}\boldsymbol{r}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\lambda\Gamma}\,,$$

$$\boldsymbol{p} \rightarrow \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\lambda\Gamma}\boldsymbol{p}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\lambda\Gamma}$$

で具体的に現れる効果を求めよ．スケール変換で軌道角運動量 $\boldsymbol{L} = \boldsymbol{r} \times \boldsymbol{p}$ はどのような影響を受けるか？

8-15　$r = |\boldsymbol{r}|$ と Γ は相補的な観測量の対をなすことを示せ．どの量子自由度がそれらと関連しているか？（ヒント: $r_0 > 0$ は任意の参照の長さで κ は任意の実数とし，ユニタリー演算子 $(r/r_0)^{\mathrm{i}\kappa}$ を考え，これと $\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\lambda\Gamma}$ とこれらの逆順の積を比較せよ）．

8-16　3 次元振動子に関する問題：動径波動関数(7.5.26)を用いて直接積分を行うことで，$n_r = 0, 1$ で任意の l の場合に期待値 $\langle r^{-2}\rangle$, $\langle r^{-3}\rangle$, $\langle r\rangle$ を求めよ．この結果と式(8.3.20), (8.3.26)および(8.3.33)を比較せよ．

8-17　水素様原子に関する問題：簡単な動径関数 $u(r)$, $n_r = 0$ を用いて $\langle r^k\rangle_n$, $n_r = 0$ を求めよ．$\langle r\rangle$, $\langle r^{-1}\rangle$, $\langle r^{-2}\rangle$, $\langle r^{-3}\rangle$ が正しく再現されているか調べよ．$[u(r)]^2$ が最大となる r の値を求めよ．$n \gg 1$ の場合に，この最大値をとる近傍で $[u(r)]^2$ の近似形を与えることができるか試みよ．

8-18　放物線座標での波動関数を

$$\psi = C\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}m\phi}}{\sqrt{2\pi}}\frac{1}{\sqrt{\xi}}u(\xi)\frac{1}{\sqrt{\eta}}u(\eta)$$

とする．動径部分の規格化を

$$\int_0^\infty \mathrm{d}\xi\,\big[u(\xi)\big]^2 = \int_0^\infty \mathrm{d}\eta\,\big[u(\eta)\big]^2 = 1$$

とし，3 次元での規格化を

$$\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,|\psi|^2 = 1$$

とする．C は何か？ 式(8.5.14)を再導出するために $\frac{\partial E}{\partial F} = \langle ez\rangle$ を使え．

8-19　式(8.6.10)ではスカラーポテンシャルとベクトルポテンシャルは，$\boldsymbol{r}$ のみに依存し，時間 t には依存しないと仮定されている．ここではこの簡単化の制限を取り去り，$\Phi(\boldsymbol{r}, t)$ および $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t)$ を考える．したがってハミルトニアンはあらわな時間依存性を獲得する．電場を $\boldsymbol{E} = -\partial\boldsymbol{A}/\partial t - \boldsymbol{\nabla}\Phi$ とし，以前と同じように磁場を $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{A}$ とすると，ローレンツ力 (8.6.20)が正しく現れることを示せ．

8-20　3次元クーロン問題：期待値 $\langle r^2 \rangle_{nl}$ を求めよ(ヒント：u 微分方程式(8.3.21)に $2r^3\frac{\mathrm{d}u}{\mathrm{d}r} - 3r^2 u$ を掛け，積分せよ)．基底状態 $n=1$ に対して，その波動関数を直接用いて計算し検証せよ．$n=1$ の状態の場合に，反磁性磁化率 χ の値は何か？（磁気エネルギーを $-\frac{1}{2}\chi B^2$ と表す．これは式(8.6.27)で $\boldsymbol{B}$ の2次の項から出る.)

8-21　電荷 $-|e|$，質量 M の粒子が，z 軸方向を向いた一様磁場 B とスカラーポテンシャル

$$\Phi = -\frac{1}{2}Q\left(z^2 - \frac{x^2+y^2}{2}\right), \qquad \boldsymbol{\nabla}^2\Phi = 0, \qquad Q > 0$$

から導かれる電場の中で運動している．この系のエネルギー固有値はなにか？一般的な(特殊な関係の場合を除く)場合の，多重度は何か？（ヒント：自然なゲージでの3次元シュレーディンガー方程式を調べよ．Q をあまり大きいとしてはいけない.)

8-22　式(8.8.23)の入射波 $\psi_{\text{inc.}}$ に関して：一定位相面 $kz - \beta\log(kr - kz)$ は $\beta = 0$ 以外では一定の z 平面ではない．対数項によって引き起こされる緩いゆがみについての感覚を得るために，z 軸上の離れた点($r = -z = R$, $kR \gg 1$, $Ze^2/R \ll Mv^2$)を考え，この点での位相と同じ位相を持つ $z = 0$ 面上での点を求めよ．それらの点と原点からの距離 r の値はどれほど大きいか？

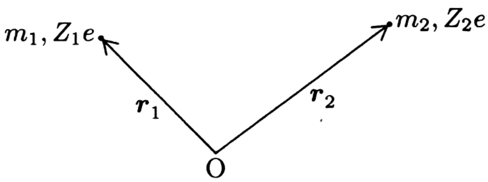
C.　春学期：相互作用する粒子

第9章

クーロン力の働く2粒子問題

9.1 内部と重心運動

8章においては，水素様原子をその原子核があたかも無限に重いとして扱った．ここでは解析を精密化して，質量がそれぞれ m_1 と m_2 で電荷が Z_1e と Z_2e の2粒子系について考えよう．



これよりハミルトニアンは以下のように書ける．

$$H = \frac{\boldsymbol{p}_1^2}{2m_1} + \frac{\boldsymbol{p}_2^2}{2m_2} + \frac{Z_1Z_2e^2}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|} \,. \tag{9.1.1}$$

ここで重心の位置ベクトル

$$\boldsymbol{R} = \frac{m_1\boldsymbol{r}_1 + m_2\boldsymbol{r}_2}{m_1 + m_2} \tag{9.1.2}$$

および相対の位置ベクトル

$$\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2 \tag{9.1.3}$$

を導入すると全運動量は

$$\boldsymbol{P} = \boldsymbol{p}_1 + \boldsymbol{p}_2 \tag{9.1.4}$$

となり，相対運動量は

$$\boldsymbol{p}=\frac{m_2\boldsymbol{p}_1-m_1\boldsymbol{p}_2}{m_1+m_2} \tag{9.1.5}$$

となる．これより各粒子の座標と運動量は次のように書ける．

$$\boldsymbol{r}_1=\boldsymbol{R}+\frac{m_2}{m_1+m_2}\boldsymbol{r}\,,\qquad \boldsymbol{r}_2=\boldsymbol{R}-\frac{m_1}{m_1+m_2}\boldsymbol{r}\,,$$
$$\boldsymbol{p}_1=\frac{m_1}{m_1+m_2}\boldsymbol{P}+\boldsymbol{p}\,,\qquad \boldsymbol{p}_2=\frac{m_2}{m_1+m_2}\boldsymbol{P}-\boldsymbol{p}\,. \tag{9.1.6}$$

ここで現れた係数は，ラグランジアン

$$L=\boldsymbol{p}_1\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1}{\mathrm{d}t}+\boldsymbol{p}_2\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2}{\mathrm{d}t}-H \tag{9.1.7}$$

を，新しい変数で書くと以下のようになることより明白になる．

$$\begin{aligned}\boldsymbol{p}_1\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_1}{\mathrm{d}t}+\boldsymbol{p}_2\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_2}{\mathrm{d}t}=&\left(\frac{m_1}{m_1+m_2}\boldsymbol{P}+\boldsymbol{p}\right)\cdot\left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{R}}{\mathrm{d}t}+\frac{m_2}{m_1+m_2}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\right)\\&+\left(\frac{m_2}{m_1+m_2}\boldsymbol{P}-\boldsymbol{p}\right)\cdot\left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{R}}{\mathrm{d}t}-\frac{m_1}{m_1+m_2}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\right)\\=&\boldsymbol{P}\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{R}}{\mathrm{d}t}+\boldsymbol{p}\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\,.\end{aligned} \tag{9.1.8}$$

この式より，$\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{p}_1$ および $\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{p}_2$ が $3+3=6$ の自由度を記述しているように，$\boldsymbol{R},\boldsymbol{P}$ と $\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}$ の対が6自由度を記述することがすぐにわかる．そして交換関係は次の式以外はゼロとなる．

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[R_k,P_k]=1\,,\quad \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[r_k,p_k]=1\,. \tag{9.1.9}$$

式(9.1.1)のハミルトニアンの中の，運動エネルギーの項は

$$\frac{\boldsymbol{p}_1^2}{2m_1}+\frac{\boldsymbol{p}_2^2}{2m_2}=\frac{\boldsymbol{P}^2}{2M}+\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu} \tag{9.1.10}$$

と書ける．ここで

$$M=m_1+m_2 \tag{9.1.11}$$

は全質量であり

$$\mu=\left(\frac{1}{m_1}+\frac{1}{m_2}\right)^{-1}=\frac{m_1m_2}{m_1+m_2} \tag{9.1.12}$$

は換算質量である．そしてクーロンポテンシャルは

$$\frac{Z_1Z_2e^2}{|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|}=\frac{Z_1Z_2e^2}{r} \tag{9.1.13}$$

となり，2粒子間の相対距離 $r=|\boldsymbol{r}|$ だけに依存する．したがってラグランジアンは以下のように2項に分離できる．

$$L=L_{\mathrm{ext}}+L_{\mathrm{int}}\,. \tag{9.1.14}$$

ここで重心部分は

$$L_{\text{ext}} = \boldsymbol{P} \cdot \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{R}}{\mathrm{d}t} - \frac{\boldsymbol{P}^2}{2M} \tag{9.1.15}$$

のように書け，系全体の運動を記述し，質量が M で自由粒子の運動となる．内部部分は

$$L_{\text{int}} = \boldsymbol{p} \cdot \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} - \left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu} + \frac{Z_1 Z_2 e^2}{r}\right) = \boldsymbol{p} \cdot \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} - H_{\text{int}} \tag{9.1.16}$$

となり，2 粒子間の相対運動を記述する．

電子(粒子 1)と原子核(粒子 2)から成る水素様原子に対しては，それぞれの質量は以下のようになる．

$$m_1 = m_{\text{el}}\ , \quad m_2 = m_{\text{nucl}} = M - m_{\text{el}}\ , \qquad M, m_{\text{nucl}} \gg m_{\text{el}}\ ;$$
$$\mu = \frac{m_{\text{el}}(M - m_{\text{el}})}{M} = m_{\text{el}}\left(1 - \frac{m_{\text{el}}}{M}\right) \cong m_{\text{el}}\left(1 - \frac{m_{\text{el}}}{m_{\text{nucl}}}\right)\ . \tag{9.1.17}$$

もう 1 つの例はポジトロニウムで，これは互いに質量は等しく電荷が逆符号の電子と陽電子から成る．

$$M = 2m_{\text{el}}\ , \quad \mu = \tfrac{1}{2}m_{\text{el}}\ . \tag{9.1.18}$$

ボーアの水素様原子のエネルギーは $(m_{\text{nucl}} =)M = \infty$ の場合は，式(8.1.16)において $M \to m_{\text{el}}$ および $Z \to -Z_1 Z_2 = Z$ として，次のようになる．

$$E_\infty = -\frac{m_{\text{el}} Z^2 e^4}{2n^2 \hbar^2}\ . \tag{9.1.19}$$

より正確な取り扱いでは，電子の質量 m_{el} を換算質量 μ で置き換えればよい．

$$E = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2n^2 \hbar^2} = (1 - \frac{m_{\text{el}}}{M})E_\infty\ . \tag{9.1.20}$$

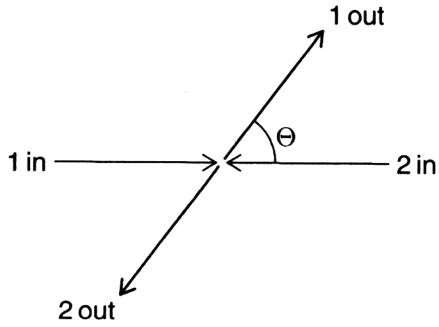
ここで E_∞ は $m_{nucl} \to \infty$ の極限でのエネルギーである．ポジトロニウムについては E_∞ において $Z = 1$ として以下のようになる．

$$E = \tfrac{1}{2}E_\infty\ . \tag{9.1.21}$$

散乱に対しては，断面積は式(8.8.26)で与えられており，そこで $Z \to -Z_1 Z_2$ とし，$M \to \mu$，および $\theta \to \Theta$ とすればよいことは明らかであろう．

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \left(\frac{Z_1 Z_2 e^2}{2\mu v^2}\right)^2 \frac{1}{\sin^4\left(\frac{1}{2}\Theta\right)}\ . \tag{9.1.22}$$

ただし v はここでも 2 粒子の十分離れたところでの相対速度である．これは相対の運動に関する記述なので，重心が動いていないとき，つまり全運動量が $\boldsymbol{P} = \boldsymbol{p}_1 + \boldsymbol{p}_2 = 0$ の場合にのみそのまま適用できる．この状況では下図(すべての運動量ベクトルの大きさは等しい)に示されているように，衝突時の運動量の関係は $\boldsymbol{p}_1 = -\boldsymbol{p}_2 = \boldsymbol{p}$ である．



そして Θ は相対運動量 $\boldsymbol{p}$ の方向の変化を表す角度である．

9.2　ラザフォード散乱再考

微分断面積には以下の量の比 β/k (式(8.8.25)を参照)だけが入ってくる．ただし波動関数の漸近形は β と k の両方に関係している．β はもともと $Ze^2/\hbar v$ と書かれていたがここでは

$$\beta = -\frac{Z_1 Z_2 e^2}{\hbar v} \tag{9.2.1}$$

で与えられ，v は2粒子が十分遠くに離れたときの相対速度で

$$k = \frac{1}{\hbar}p = \frac{1}{\hbar}\mu v \tag{9.2.2}$$

より，相対速度と相対運動量は換算質量によって関係付けられることに注意しよう．ここで波動関数の漸近形(ここでも θ を使う)を思い出そう(式(8.8.23)を参照)．

$$\begin{aligned}\psi \propto\, &\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta\log\left(2kr\sin^2(\frac{1}{2}\theta)\right)} \\ &+ \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r}\frac{\beta}{2k\sin^2(\frac{1}{2}\theta)}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta\log\left(2kr\sin^2(\frac{1}{2}\theta)\right)}\,\mathrm{e}^{-2\mathrm{i}\arg\left((\mathrm{i}\beta)!\right)}\,.\end{aligned} \tag{9.2.3}$$

この式を導くのに放物線座標を用いたが，ここでは極座標を使って検討する．この座標の方が，クーロンポテンシャルからのずれが問題になる，たとえば陽子－陽子散乱でエネルギーを上げることで核力が重要になってくるような場合は，より有用である．

まず平面波を

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr\cos\theta} \tag{9.2.4}$$

のように極座標で表そう．方位角 ϕ はここでは現れないから角度部分の関数の完全な組はルジャンドルの多項式 $\mathrm{P}_l(\zeta = \cos\theta)$ である(3.7節を参照)．したがってこれを

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr\cos\theta} = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{i}^l \mathrm{j}_l(kr)\mathrm{P}_l(\cos\theta) \tag{9.2.5}$$

のように展開しよう．ここで係数 i^l は関数 j_l を実関数にするためである．実際，両辺の複素共役をとり，同時に $\zeta \to -\zeta$ とすると，左辺 $\mathrm{e}^{ikr\zeta}$ は不変である．そして右辺の $\mathrm{i}^l\mathrm{P}_l(\zeta)$ は

$$(-\mathrm{i})^l\mathrm{P}_l(-\zeta) = \mathrm{i}^l\mathrm{P}_l(\zeta) \tag{9.2.6}$$

となり，j_l は実数でなければならない．問題 3-15 の直交関係を思い出すと，j_l は以下のように具体的に積分形で与えられる．

$$\mathrm{i}^l\mathrm{j}_l(kr) = \frac{1}{2}\int_{-1}^{1}\mathrm{d}\zeta\,\mathrm{P}_l(\zeta)\,\mathrm{e}^{ikr\zeta}\ . \tag{9.2.7}$$

ここでの目的のためには，次の漸近的な形($x = kr \gg 1$)

$$\begin{aligned}
\mathrm{i}^l\mathrm{j}_l(x) &= \frac{1}{2}\int_{-1}^{1}\mathrm{d}\zeta\,\mathrm{P}_l(\zeta)\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\zeta}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}x\zeta}}{\mathrm{i}x} \\
&= \frac{1}{2}\left[\mathrm{P}_l(1)\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}x}}{\mathrm{i}x} - \mathrm{P}_l(-1)\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}x}}{\mathrm{i}x}\right] - \frac{1}{2}\int_{-1}^{1}\mathrm{d}\zeta\,\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}x\zeta}}{\mathrm{i}x}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\zeta}\mathrm{P}_l(\zeta) \\
&\cong \frac{1}{2\mathrm{i}x}[\mathrm{e}^{\mathrm{i}x} - (-1)^l\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}x}] = \mathrm{i}^l\frac{1}{2\mathrm{i}x}\left(\mathrm{i}^{-l}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}x} - \mathrm{i}^l\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}x}\right)
\end{aligned} \tag{9.2.8}$$

つまり

$$\mathrm{j}_l(x) \cong \frac{\sin\left(x - \frac{1}{2}\pi l\right)}{x} \tag{9.2.9}$$

だけで十分である．したがって次の式が，式(9.2.4)の平面波をルジャンドルの多項式で漸近展開したものとなる．

$$\mathrm{e}^{ikr\cos\theta} \cong \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{i}^l\frac{\sin\left(kr - \frac{1}{2}\pi l\right)}{kr}\mathrm{P}_l(\cos\theta)\ . \tag{9.2.10}$$

クーロンポテンシャルに対する軸対称な波動関数は

$$\psi(r,\theta) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\mathrm{i}^l R_l(r)\mathrm{P}_l(\cos\theta)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l} \tag{9.2.11}$$

と書くことができる．動径部分の実関数 R_l は次のシュレーディンガー方程式にしたがう．

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} + \frac{2}{r}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r} - \frac{l(l+1)}{r^2} + \frac{2\mu}{\hbar^2}\left(E - \frac{Z_1Z_2e^2}{r}\right)\right]R_l(r) = 0\ . \tag{9.2.12}$$

ここで

$$R_l(r) = \frac{u_l(r)}{r}\ ,\quad E = \frac{p^2}{2\mu} = \frac{\hbar^2k^2}{2\mu}\ ,\quad -\frac{Z_1Z_2e^2\mu}{\hbar^2} = \beta k \tag{9.2.13}$$

とすると，より簡潔に

$$\left[\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2} - \frac{l(l+1)}{r^2} + k^2 + \frac{2\beta k}{r}\right]u_l(r) = 0 \tag{9.2.14}$$

と書ける．

以前の水素様原子の束縛状態(式(8.1.8)で $(2M/\hbar^2)V(r) = -2Z/(a_0 r)$ および $2ME/\hbar^2 = -Z^2/(na_0)^2$ としたもの)の議論との対応は

$$k^2 \longleftrightarrow -\frac{Z^2}{n^2 a_0^2} = -\frac{\beta^2 k^2}{n^2} \tag{9.2.15}$$

つまり

$$\beta k \longleftrightarrow \frac{Z}{a_0} \quad \text{ここで} \quad a_0 \longleftrightarrow \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \quad \text{および} \quad Z \longleftrightarrow -Z_1 Z_2 \tag{9.2.16}$$

となる．したがって次のような対応となる．

$$n \longleftrightarrow -\mathrm{i}\beta \quad \text{および} \quad \frac{Z}{na_0} \longleftrightarrow \mathrm{i}k\,. \tag{9.2.17}$$

ここでiの符号はどちらでもよい．

式(8.1.33)の束縛状態の波動関数に対して上記の対応をつけると，したがって以下のようになることに注意しよう．

$$\begin{aligned} R_l &\propto \left(\frac{2Zr}{na_0}\right)^l \mathrm{L}_{n-l-1}^{(2l+1)}\left(\frac{2Zr}{na_0}\right) \mathrm{e}^{-\frac{Zr}{na_0}} \\ &\to (2kr)^l \mathrm{L}_{-\mathrm{i}\beta-l-1}^{(2l+1)}(2\mathrm{i}kr)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}\,. \end{aligned} \tag{9.2.18}$$

8.8節で扱ったと同様に，ラゲールの多項式

$$\mathrm{L}_\nu^{(\alpha)}(x) = \frac{(-1)^\alpha}{\nu!}\,\mathrm{e}^x \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\alpha}\right)^{\nu+\alpha} x^\nu\,\mathrm{e}^{-x} \tag{9.2.19}$$

を線積分表示を使って整数でない ν に拡張すると

$$\mathrm{L}_\nu^{(\alpha)}(x) = (-1)^\alpha \frac{(\nu+\alpha)!}{\nu!}\,\mathrm{e}^x \oint \frac{\mathrm{d}t}{2\pi\mathrm{i}}\,\frac{t^\nu\,\mathrm{e}^{-t}}{(t-x)^{\nu+\alpha+1}} \tag{9.2.20}$$

となる．ここで積分路は式(8.8.15)で示されている．これより波動関数は

$$R_l \propto \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}(2kr)^l \oint \frac{\mathrm{d}t}{2\pi\mathrm{i}} t^{-\mathrm{i}\beta-l-1}(t-2\mathrm{i}kr)^{\mathrm{i}\beta-l-1}\,\mathrm{e}^{-t} \tag{9.2.21}$$

と書ける．ここで変数を

$$t \to t + \mathrm{i}kr \tag{9.2.22}$$

とすると，以下のようにより扱いやすい形となる．

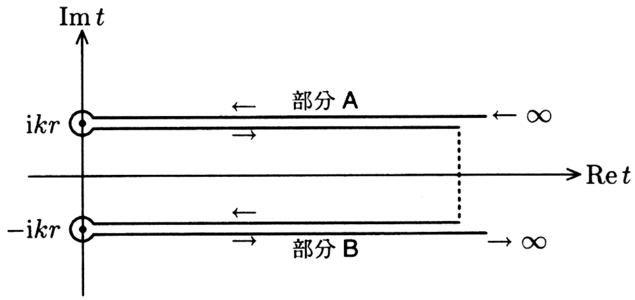
$$R_l \propto (2kr)^l \oint \frac{\mathrm{d}t}{2\pi\mathrm{i}}(t-\mathrm{i}kr)^{\mathrm{i}\beta-l-1}(t+\mathrm{i}kr)^{-\mathrm{i}\beta-l-1}\,\mathrm{e}^{-t}\,. \tag{9.2.23}$$

まず初めに上記の波動関数が $r \to 0$ で物理的に許容できる解を持つかどうか，つまり r^l と r^{-l-1} の振る舞いをする関数の中で前者であるかどうかを確かめよう．そこで $r=0$ として積分を実行する．結果は

$$
\begin{aligned}
\oint \frac{\mathrm{d}t}{2\pi \mathrm{i}}\, t^{\mathrm{i}\beta-l-1} t^{-\mathrm{i}\beta-l-1}\, \mathrm{e}^{-t} &= \oint \frac{\mathrm{d}t}{2\pi \mathrm{i}} \frac{\mathrm{e}^{-t}}{t^{2l+2}} \\
&= \frac{1}{(2l+1)!} \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\right)^{2l+1} \mathrm{e}^{-t}\Big|_{t\,=\,0} \\
&= -\frac{1}{(2l+1)!}
\end{aligned}
\tag{9.2.24}
$$

となり，実際 R_l は $r \to 0$ で，r^l となる正しい振る舞いをしていることがわかる．

被積分関数で，$\mathrm{i} \to -\mathrm{i}$ としても不変なことから関数は本質的には実関数であることに注意しておこう．さて，これから $kr \gg 1$ における関数の漸近形を求めよう．特異点が $\pm \mathrm{i}kr$ であることと，e^{-t} の形をしていることから積分路を下図のようにとろう．



(9.2.25)

これは式(8.8.17)の積分路を，式(9.2.22)にしたがって移動させたものである．

A の部分からの寄与は，$t = \mathrm{i}kr + u$ として，積分範囲を $u : \infty \to 0 \to \infty$ とすると，$kr \gg 1$ に対して以下の結果を得る．

$$
\begin{aligned}
\Big[R_l(r)\Big]_{\mathrm{A}} &= (2kr)^l (2\mathrm{i}kr)^{-\mathrm{i}\beta-l-1} \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{2\pi \mathrm{i}} \left[\int_\infty^0 \mathrm{d}u\, u^{\mathrm{i}\beta-l-1}\, \mathrm{e}^{-u} \right. \\
&\qquad\qquad \left. + \int_0^\infty \mathrm{d}u\, (\,\mathrm{e}^{2\pi \mathrm{i}} u)^{\mathrm{i}\beta-l-1}\, \mathrm{e}^{-u}\right] \\
&= -\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{2kr}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta \log(2kr)}\, \mathrm{e}^{\frac{1}{2}\pi\beta} \mathrm{i}^{-l} \frac{1}{2\pi} \underbrace{(\,\mathrm{e}^{-2\pi\beta} - 1)}_{=\,-2\,\mathrm{e}^{-\pi\beta}\sinh(\pi\beta)} (\mathrm{i}\beta - l - 1)! \\
&= \frac{1}{2kr}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left[kr + \beta \log(2kr) + \frac{1}{2}\pi l\right]}\, \mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\pi\beta} \frac{1}{\pi} \sinh(\pi\beta)\, (\mathrm{i}\beta - l - 1)!\,.
\end{aligned}
\tag{9.2.26}
$$

さて，ここで次の階乗関数の性質に注目しよう．

$$
z!(-z)! = \frac{\pi z}{\sin(\pi z)} \quad \text{または} \quad (z-1)!(-z)! = \frac{\pi}{\sin(\pi z)}\,. \tag{9.2.27}
$$

これより $z = -\mathrm{i}\beta + l + 1$ とすると

$$
(\mathrm{i}\beta - l - 1)!\,(-\mathrm{i}\beta + l)! = \frac{\pi}{\sin\big(\pi(l + 1 - \mathrm{i}\beta)\big)} = (-1)^{l+1} \frac{\pi \mathrm{i}}{\sinh(\pi\beta)} \tag{9.2.28}
$$

となり，次の関係式が得られる．

$$\sinh(\pi\beta)\,(\mathrm{i}\beta - l - 1)! = (-1)^{l+1}\frac{\pi\mathrm{i}}{(-\mathrm{i}\beta + l)!}\,. \tag{9.2.29}$$

これよりAの部分からの寄与は以下のようになる．

$$\Big[R_l(r)\Big]_\mathrm{A} = -\frac{\mathrm{i}}{2kr}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\left[kr + \beta\log(2kr) - \frac{1}{2}\pi l + \arg\left((l-\mathrm{i}\beta)!\right)\right]}\frac{\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\pi\beta}}{|(l-\mathrm{i}\beta)!|}\,. \tag{9.2.30}$$

同様にして，Bの部分からの寄与は，$t = -\mathrm{i}kr + u$ として，積分範囲を $u : \infty \to 0 \to \infty$ とすると

$$\Big[R_l(r)\Big]_\mathrm{B} = \frac{\mathrm{i}}{2kr}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left[kr + \beta\log(2kr) - \frac{1}{2}\pi l + \arg\left((l-\mathrm{i}\beta)!\right)\right]}\frac{\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\pi\beta}}{|(l-\mathrm{i}\beta)!|} \tag{9.2.31}$$

となり，これは予想したようにちょうどAの部分からの寄与の複素共役である．したがって，波動関数は以下のようになる．

$$R_l(r) \propto \frac{\mathrm{e}^{-\frac{1}{2}\pi\beta}}{|(l-\mathrm{i}\beta)!|}\frac{\sin\Big(kr + \beta\log(2kr) - \frac{1}{2}\pi l + \arg\big((l-\mathrm{i}\beta)!\big)\Big)}{kr}\,. \tag{9.2.32}$$

それではどのようにして r に依存しない比例係数を見つけることができるだろうか？

そこで式(9.2.5)に返り，kr が十分大きいときの漸近形(9.2.9)を適用してみよう．

$$\mathrm{i}^l\mathrm{j}_l(kr) \cong \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{2\mathrm{i}kr} - (-1)^l\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{2\mathrm{i}kr}\,. \tag{9.2.33}$$

動径部分の運動という観点からすると，$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}$ は内向き球面波を記述し，$\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}$ は外向き球面波を記述する．もし仮にクーロンポテンシャルが長距離力でなければ，相互作用の影響は出て行く波を生じさせるだけで，十分遠くにある入射波は相互作用の存在には影響されないとする議論が可能であろう．このことは厳密に正しい訳ではないが，クーロン相互作用の場合でもこのように扱ってもほとんど問題ない(問題8-22を参照)．

次の式

$$\psi = \sum_l (2l+1)\mathrm{i}^l\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}R_l(r)\mathrm{P}_l(\cos\theta) \tag{9.2.34}$$

の内向き球面波の部分が，$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l}R_l \to \mathrm{j}_l(kr)$ とした入射波 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}$ の内向き球面波の部分と一致するためには，式(9.2.32)の $(\mathrm{i}kr)^{-1}\sin(kr + \cdots)$ の係数は1でなければならない．したがって求めるべき比例係数は以下のようになる．

$$-\,\mathrm{e}^{\frac{1}{2}\pi\beta}|(l-\mathrm{i}\beta)!|\,. \tag{9.2.35}$$

これより内向きの球面波の部分は以下のようになる．

$$\mathrm{i}^l R_l(r)_{\mathrm{inc.}} = -(-1)^l\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}kr}}{2\mathrm{i}kr}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta\log(2kr)}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\arg\left((l-\mathrm{i}\beta)!\right)}\,. \tag{9.2.36}$$

係数 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\beta\log(2kr)}$ は長距離力による効果で，l には依存しない単にゆっくりと変化す

る位相である．しかし，位相 $e^{-i\arg((l-i\beta)!)}$ の部分は除かなければならない．つまり，これが $e^{i\delta_l}$ をつけた意図であり，以下のようにとればよい．

$$\delta_l = \arg\big((l-i\beta)!\big) . \tag{9.2.37}$$

実際，正確に解かれた解は係数 $e^{-i\beta\log(2kr)}$ がついており，さらに $e^{-i\beta\log(\sin^2(\frac{1}{2}\theta))}$ の因子もつく．しかし，この因子はここで求めた以下の波動関数には現れていない．

$$\psi = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)i^l\, e^{i\delta_l} R_l(r) P_l(\cos\theta) ,$$

$$\text{ここで } R_l \cong \frac{1}{kr}\sin\big(kr + \beta\log(2kr) - \tfrac{1}{2}\pi l + \delta_l\big) . \tag{9.2.38}$$

それは，ここで使った大まかな漸近展開のため現れなかったのである．

ここで，この散乱の波動関数を使って以下の問いに対して答えてみよう．入射波の振幅は 1 である，つまり，入射ビームの(相対)確率密度は以下のようになる．

$$|\psi_{\text{inc.}}|^2 = \left|e^{ikz}\, e^{-i\beta\log\cdots}\right|^2 = 1 . \tag{9.2.39}$$

それでは，粒子が相互作用をするときの原点での確率密度はどうなるだろうか？ 波動関数は $R_l \propto r^l$ のように振る舞うので，$r \to 0$ で寄与するのは $l=0$ の部分だけで

$$\psi(0) = e^{i\delta_0} R_0(0) \tag{9.2.40}$$

となる．式(9.2.24)より逆符号となっているが，これは式(9.2.35)の比例係数

$$R_0(0) = e^{\frac{1}{2}\pi\beta}|(l-i\beta)!| \tag{9.2.41}$$

であり，原点での確率密度は次のようになる．

$$|\psi(0)|^2 = e^{\pi\beta}(-i\beta)!(i\beta)! = e^{\pi\beta}\frac{\pi\beta}{\sinh(\pi\beta)} . \tag{9.2.42}$$

ここで 2 通りの場合が考えられる．

$$\text{引力的相互作用, } Z_1Z_2<0,\ \beta>0:\ |\psi(0)|^2 = \frac{2\pi\beta}{1-e^{-2\pi\beta}} > 1 ,$$

$$\text{斥力的相互作用, } Z_1Z_2>0,\ \beta<0:\ |\psi(0)|^2 = \frac{2\pi|\beta|}{e^{2\pi|\beta|}-1} < 1 . \tag{9.2.43}$$

これは当然の結果であり，驚くことではない．

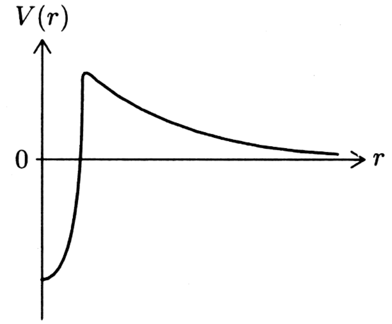
特に興味あるのが $-\beta = Z_1Z_2e^2/(\hbar v) \gg 1$ (斥力)つまり $v \ll Z_1Z_2e^2/\hbar$ の場合である．この場合は

$$|\psi(0)|^2 \cong 2\pi|\beta|\, e^{-2\pi|\beta|} \ll 1 \tag{9.2.44}$$

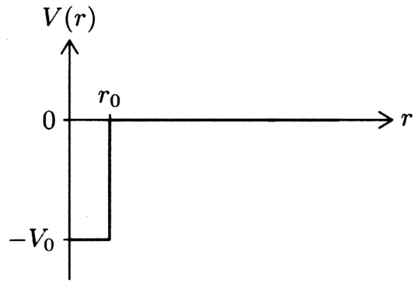
となり，これは半古典論的な状況である．古典的に禁止される領域へ侵入する確率は小さいがゼロではない．どの程度の範囲で，半古典的な WKB の記述が結果を再現できるのだろうかと考える人がいるだろうが，ここではこの問題についてはこれ以上探求はしない．

9.3 近距離力の付加

さて，衝突する粒子が非常に近くに来て，別の力が働き始めたとしよう．たとえば，陽子－陽子散乱で近距離力の核力が十分高エネルギーでは重要になってくるような場合である．この影響は接触が可能な角運動量が $l = 0$ の状態でまず現れ始める．この場合のポテンシャルは，たとえば以下のようなものである．



そこで，まず準備として，以下のようなクーロンポテンシャルを除いた簡単な模型から考察を始めよう．



シュレーディンガー方程式は，$R(r) = (kr)^{-1}u(r)$ として

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)^2 u = \begin{cases} [2\mu(E+V_0)/\hbar^2]u = \kappa^2 u & (\ r < r_0\ )\ , \\ (2\mu E/\hbar^2)u = k^2 u & (\ r > r_0\ ) \end{cases} \tag{9.3.1}$$

と書け，$u(0) = 0$ であることに注意すると解は

$$u(r) = \begin{cases} C\sin(\kappa r) & (\ r < r_0\ )\ , \\ \sin(kr + \Delta) & (\ r > r_0\ ) \end{cases} \tag{9.3.2}$$

となる．実定数である振幅 C および位相 Δ は，波動関数が r_0 で連続的につながるための条件

$$C\sin(\kappa r_0) = \sin(kr_0 + \Delta) \tag{9.3.3}$$

およびその微分係数が連続であるという条件

$$\kappa C\cos(\kappa r_0) = k\cos(kr_0 + \Delta) \tag{9.3.4}$$

から決定される．これより

$$\kappa\cot\kappa r_0 = k\cot(kr_0 + \Delta) \tag{9.3.5}$$

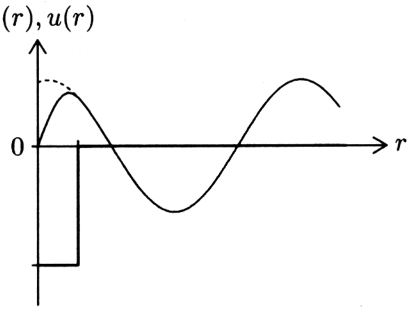
が得られ，Δ は

$$\Delta = -kr_0 + \cot^{-1}\left(\frac{\kappa}{k}\cot(kr_0)\right) = -kr_0 + \tan^{-1}\left(\frac{k}{\kappa}\tan(\kappa r_0)\right) \tag{9.3.6}$$

となり，C は次のようになる．

$$C = \frac{k}{\kappa}\frac{\cos(kr_0 + \Delta)}{\cos(\kappa r_0)} = \frac{\sin(kr_0 + \Delta)}{\sin(\kappa r_0)}\ . \tag{9.3.7}$$

どのような状況になっているかを見るためには次の図が役に立つだろう．



ここで点線は外側の波動関数をそのまま内側にまで内挿したものであり，原点でゼロとならない．これは外側の波動関数の位相がポテンシャルが $V_0 = 0$ の場合に比べてずれていることを意味する（ずれは Δ で**位相差**と呼ぶ）．

同じことがクーロンポテンシャルと近距離力がある場合にも起こり，波動関数は

$$\overline{R}_0(r) \propto \frac{1}{kr}\sin\left(kr + \beta\log(2kr) + \delta_0 + \Delta\right) \tag{9.3.8}$$

となる．ただしクーロンポテンシャルだけだと以下の形である．

$$R_0(r) \sim \frac{1}{kr}\sin\left(kr + \beta\log(2kr) + \delta_0\right)\ . \tag{9.3.9}$$

ここで，与えられた内向き球面波を同じ形に保つためには，$l = 0$ からの寄与 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_0}R_0(r)$ を除いて $\mathrm{e}^{\mathrm{i}(\delta_0 + \Delta)}\overline{R}_0(r)$ を加えればよい．

$$\psi = \psi_{\mathrm{Coul.}} + \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\delta_0 + \Delta)}\overline{R}_0(r) - \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_0}R_0(r)\ . \tag{9.3.10}$$

そして $\delta_0 = \arg\big((-\mathrm{i}\beta)!\big) = -\arg\big((\mathrm{i}\beta)!\big)$ であることを思い出すと，散乱波は

$$\psi_{\text{scatt.}} \cong \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\left(kr + \beta\log(2kr) + 2\delta_0\right)}}{r} f(\theta) \tag{9.3.11}$$

と書ける．ここで散乱振幅は次の式で与えられる．

$$f(\theta) = \frac{\beta}{2k\sin^2(\frac{1}{2}\theta)}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta\log\left(\sin^2(\frac{1}{2}\theta)\right)} + \frac{1}{k}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\Delta}\sin\Delta\ . \tag{9.3.12}$$

以上より，重心系で散乱角を Θ とすると，微分散乱断面積は以下のようになる．

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} &= r^2\left|\psi_{\text{scatt.}}\right|^2 = \left|f(\Theta)\right|^2 \\ &= \left(\frac{\beta}{2k}\right)^2\frac{1}{\sin^4(\frac{1}{2}\Theta)} + \frac{\sin^2\Delta}{k^2} \\ &\quad + \frac{\beta}{k^2}\frac{\sin\Delta}{\sin^2(\frac{1}{2}\Theta)}\cos\left(\Delta - \beta\log\left(\sin^2(\tfrac{1}{2}\Theta)\right)\right)\ .\end{aligned} \tag{9.3.13}$$

第 1 項目は式(9.1.22)のラザフォードの散乱断面積で，最後の項は干渉による純粋に量子力学的な項である．この項は古典的な極限 $\beta \to \infty$ では激しく振動する．

9.4　同種粒子の散乱

さて，ここで今までの議論は，実際には異なる 2 個の粒子の問題にのみ適用できるということを指摘しておこう．つまり，たとえば陽子と重陽子，重陽子と 3 重陽子などで，2 個の同種粒子，たとえば陽子と陽子には適用できない．同種粒子においては何が特殊なのだろうか？

1 および 2 と名付けられた粒子に対するシュレーディンガー方程式について考えてみよう．これらの数字は各々の粒子の種々の物理量を表すものとしても使うことにする．

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle 1,2,t| = \langle 1,2,t|H(1,2)\ . \tag{9.4.1}$$

2 個の粒子が同種であるということは名付けの指定はまったく任意であることを意味し，力学的に何の差も生じない．

$$H(1,2) = H(2,1)\ . \tag{9.4.2}$$

したがって，1 と 2 を交換することで次の式を得る．

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\langle 2,1,t| = \langle 2,1,t|H(1,2)\ . \tag{9.4.3}$$

これの意味することは，区別できない状態 $\langle 1,2,t|$ と $\langle 2,1,t|$ は位相の差を除いて同じ状態であるということである．

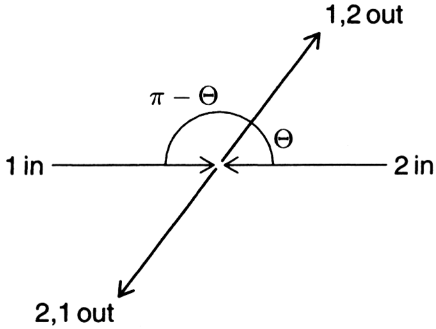
$$\langle 2,1,t| = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\langle 1,2,t|\ . \tag{9.4.4}$$

ここで φ は定数である．もう一度 $1 \leftrightarrow 2$ と交換すると，次のようになる．

$$\langle 1,2,t| = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi}\langle 2,1,t| = (\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi})^2\langle 1,2,t| \,. \tag{9.4.5}$$

これより $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} = \pm 1$ となり，2 通りの可能性があることがわかる．$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} = +1$ に対しては，波動関数は粒子番号について対称($\langle 1,2| = \langle 2,1|$)であり，このとき粒子はボース*・アインシュタイン(BE)統計にしたがうという．$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} = -1$ の場合は，波動関数は反対称($\langle 1,2| = -\langle 2,1|$)で，フェルミ†・ディラック(FD)統計にしたがう．

散乱において同種であることの重要性は次の重心系での図で示すことができる．



つまりこの図は，散乱された後で上向きに出ていった粒子は，角度 Θ だけ曲げられた粒子 1 なのか，それとも角度 $\pi - \Theta$ だけ曲げられた粒子 2 なのかを知ることはできないことを示している．したがって，波動関数の対称性と粒子の統計性に十分注意をして，両方の事象を記述できる波動関数を用いなければならない．ではどのようにしてある特定の粒子の統計性を見出せるのだろうか？

2 つの ^{4}He 原子核(α 粒子)の散乱を考えよう．散乱振幅 $f(\Theta)$ は粒子 1 が上向きに出て行く散乱過程を記述し，$f(\pi - \Theta)$ は粒子 2 が上向きに出て行く過程を記述する．終状態で粒子のラベル 1 と 2 を交換することで得られる 2 個の散乱振幅の組み合わせはそれぞれ $f(\Theta) \pm f(\pi - \Theta)$ であり，統計性にしたがい以下のようになる．

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \left|f(\Theta) \pm f(\pi - \Theta)\right|^2 \quad \text{複号は} \begin{cases} \text{BE 統計} \\ \text{FD 統計.} \end{cases} \tag{9.4.6}$$

純粋なクーロンポテンシャルによる散乱の場合は，散乱振幅 $f(\Theta)$ と $f(\pi - \Theta)$ は式(9.2.3)で求まっている．ここで最後の因子は θ に依らないので，今は無関係な因子である．したがって修正されたラザフォードの散乱断面積は，以下のようになる．

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} &= \left(\frac{\beta}{2k} = -\frac{(2e)^2}{2\mu v^2}\right)^2 \left|\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta\log\left(\sin^2(\frac{1}{2}\Theta)\right)}}{\sin^2(\frac{1}{2}\Theta)} \pm \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}\beta\log\left(\cos^2(\frac{1}{2}\Theta)\right)}}{\cos^2(\frac{1}{2}\Theta)}\right|^2 \\ &= \left(\frac{2e^2}{\mu v^2}\right)^2 \left[\frac{1}{\sin^4(\frac{1}{2}\Theta)} + \frac{1}{\cos^4(\frac{1}{2}\Theta)} \pm 2\frac{\cos\left(\beta\log\left(\tan^2(\frac{1}{2}\Theta)\right)\right)}{\sin^2(\frac{1}{2}\Theta)\cos^2(\frac{1}{2}\Theta)}\right] \,. \end{aligned} \tag{9.4.7}$$

---

*Satyendranath Bose (1894–1974) †Enrico Fermi (1901–1954)

このいわゆるモット*散乱断面積において，最初の2項は同種粒子に対する古典的な結果で，第3項が純粋に量子力学的なものである．さてそこで，直角方向への散乱についてどうなるか注意してみよう．この場合，$\Theta = \frac{1}{2}\pi = \pi - \Theta$, であり，$f(\Theta) = f(\pi - \Theta)$ となる．したがって次のようになる．

$$\left.\frac{(\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega)_{\text{quant.}}}{(\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega)_{\text{class.}}}\right|_{\Theta=\frac{1}{2}\pi} = \frac{|f \pm f|^2}{2|f|^2} = \begin{cases} 2 & \text{BE 統計}, \\ 0 & \text{FD 統計}. \end{cases} \tag{9.4.8}$$

実際，核力がまだ効いてこない低エネルギーの散乱において，観測値は2である．つまり，^{4}He は BE 粒子である．

さて，ここで ^{4}He については当然のこととして扱ってきたが，これはスピンを持たない．しかしスピンを持つ粒子もあり，その場合は対称か反対称かという要請は粒子，位置およびスピンのすべての自由度に関係する．各粒子のスピンが s である2粒子系のスピン状態は対称か反対称な状態に分けることができる．粒子のスピンが $s = \frac{1}{2}$ の場合，$(2s+1) \times (2s+1) = 4$ 通りの状態は，3通りの対称な状態と1通りの反対称な状態から成ることはすでに学んだ(3.5節を参照)．一般に，2個の変数があり各々が n 通りの値をとれるとき，反対称な組の数は $\frac{1}{2}n(n-1)$ であり，対称な組の数は $\frac{1}{2}n(n-1)+n = \frac{1}{2}n(n+1)$ となり，加えると n^2 となっている．したがって $n = 2s+1$ として，各々の割合は以下のようになる．

$$\left.\begin{matrix}\text{対称な場合の割合} \\ \text{反対称な場合の割合}\end{matrix}\right\} = \frac{\frac{1}{2}n(n \pm 1)}{n^2} = \frac{n \pm 1}{2n} = \begin{cases} \dfrac{s+1}{2s+1} > \dfrac{1}{2}, \\ \dfrac{s}{2s+1} < \dfrac{1}{2}. \end{cases} \tag{9.4.9}$$

$s = \frac{1}{2}$ の場合に確かめてみると確かに $\frac{3}{4}$ と $\frac{1}{4}$ になる．

すべてのスピン状態が同じ確率で現れる衝突に関しては，対称なスピン状態がそれぞれBE/FD統計に応じて散乱振幅は $f(\Theta) \pm f(\pi - \Theta)$ となり，反対称なスピン状態に対しては散乱振幅は $f(\Theta) \mp f(\pi - \Theta)$ となる．したがって

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} &= \frac{s+1}{2s+1}|f(\Theta) \pm f(\pi-\Theta)|^2 + \frac{s}{2s+1}|f(\Theta) \mp f(\pi-\Theta)|^2 \\ &= \underbrace{|f(\Theta)|^2 + |f(\pi-\Theta)|^2}_{\text{古典的部分}} \pm \frac{2}{2s+1}\mathrm{Re}\big(f(\Theta)^* f(\pi-\Theta)\big)\end{aligned} \tag{9.4.10}$$

となり，$\Theta = \frac{1}{2}\pi$ の場合は

$$\left.\frac{(\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega)_{\text{quant.}}}{(\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega)_{\text{class.}}}\right|_{\Theta=\frac{1}{2}\pi} = 1 \pm \frac{1}{2s+1} = \begin{cases} \dfrac{s+1}{s+\frac{1}{2}} > 1 & \text{BE 統計} \\ \dfrac{s}{s+\frac{1}{2}} < 1 & \text{FD 統計} \end{cases} \tag{9.4.11}$$

---

*Sir Nevill Francis Mott (1905–1996)

となる．このことから，原理的にはどのようにして粒子のスピンと統計性を決めることができるかがわかる．以上は経験的な事実だが，現在ではスピンと統計性は関係していることが理論的にわかっている．

$$\begin{aligned} &\text{BE 統計: } s = 0, 1, 2, \ldots \\ &\text{FD 統計: } s = \tfrac{1}{2}, \tfrac{3}{2}, \tfrac{5}{2}, \ldots . \end{aligned} \tag{9.4.12}$$

したがって可能性としては以下のようになる．

$$\left.\frac{(\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega)_{\text{quant.}}}{(\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega)_{\text{class.}}}\right|_{\Theta = \frac{1}{2}\pi} = \begin{cases} 2, \frac{4}{3}, \frac{6}{5} \ldots & \text{BE 統計,} \\ \frac{1}{2}, \frac{3}{4}, \frac{5}{6}, \ldots & \text{FD 統計.} \end{cases} \tag{9.4.13}$$

これらは互いが逆数の列となっていることに注意しよう．

9.5 保存される離心ベクトル

クーロン力の働く 2 粒子の問題を，ここで議論する内容を紹介しないで終えるわけにはいかない．ここでは水素様原子で扱った記法を使って議論する．まず以下の基本的な力学的性質を復習することから始めよう．

$$\begin{aligned} H &= \frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r} \,; \\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{r} &= \frac{1}{\mu}\boldsymbol{p}\,, \quad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{p} = -Ze^2\frac{\boldsymbol{r}}{r^3} \,; \\ \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{L} &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}) = \frac{1}{\mu}\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{p} - \frac{Ze^2}{r^3}\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{r} = 0\,. \end{aligned} \tag{9.5.1}$$

これより $\boldsymbol{L}$ を保存量と呼ぶ．これ以外にベクトルの保存量を見出せるだろうか？ そのためにとりあえず演算子の積の順序はあまり気にしないで話を進め，正しいかどうかは後で確かめることにしよう．まず次の量の時間変化を見てみよう．

$$\begin{aligned} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}) &= -\frac{Ze^2}{r^3}\boldsymbol{r}\times(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{p}) = -\frac{\mu Ze^2}{r^3}\boldsymbol{r}\times\left(\boldsymbol{r}\times\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\right) \\ &= -\frac{\mu Ze^2}{r^3}\Big(\boldsymbol{r}\underbrace{\boldsymbol{r}\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}}_{=r\mathrm{d}r/\mathrm{d}t} - r^2\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\Big) = \mu Ze^2\left(\frac{1}{r}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} - \frac{\boldsymbol{r}}{r^2}\frac{\mathrm{d}r}{\mathrm{d}t}\right) \\ &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\mu Ze^2\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)\,. \end{aligned} \tag{9.5.2}$$

したがって

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L} - \mu Ze^2\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right) = 0 \tag{9.5.3}$$

となり，これより保存ベクトルが存在することがわかる．これを積 $\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}$ に関して対称化して

$$\boldsymbol{A}=\frac{\boldsymbol{r}}{r}-\frac{1}{2\mu Ze^2}(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p}) \tag{9.5.4}$$

と書き，離心ベクトル*と呼ぶ(8.6節のベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A}$ と同じ記号を用いたが，混同する恐れはないであろう)．ここで H および離心ベクトル $\boldsymbol{A}$ はともに $\boldsymbol{p}$ の3次式より次数が低いことに注意しよう．したがって

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{A}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{A},H]=(\boldsymbol{A},H)=\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial\boldsymbol{r}}\cdot\frac{\partial H}{\partial\boldsymbol{p}}-\frac{\partial\boldsymbol{A}}{\partial\boldsymbol{p}}\cdot\frac{\partial H}{\partial\boldsymbol{r}} \tag{9.5.5}$$

が成立する．ただしポアソン括弧は暗に対称化されているとする．簡単にわかるように各項は単に $\boldsymbol{p}$ について線形であり，対称化でもって $\hbar$ に比例する項は除かれ，$\hbar^2$ の項は現れない．したがって，古典的にゼロならばこれはゼロである．

次に，$\boldsymbol{p}$ と回転の生成演算子である $\boldsymbol{L}$ との交換関係が必要となる．たとえば

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[p_x,L_y]=p_z\ ,\quad \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[p_y,L_x]=-p_z \tag{9.5.6}$$

などはよく知られた関係式である．そこで $\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}+\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p}$ の z 成分を見てみると

$$\begin{aligned}(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}+\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})_z&=p_xL_y-p_yL_x+L_xp_y-L_yp_x\\&=[p_x,L_y]-[p_y,L_x]=2\mathrm{i}\hbar p_z\end{aligned} \tag{9.5.7}$$

となるので式(9.5.6)の交換関係を次のようにまとめて書くことができる．

$$\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}+\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}\ . \tag{9.5.8}$$

これを使うと $\boldsymbol{A}$ は

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}&=\frac{\boldsymbol{r}}{r}-\frac{1}{\mu Ze^2}(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p})\\&=\frac{\boldsymbol{r}}{r}-\frac{1}{\mu Ze^2}(-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p}+\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p})\end{aligned} \tag{9.5.9}$$

と書くこともできる．

ここで $\boldsymbol{A}^2$ とは何だろうか？ 式(9.5.9)の両方の書き方を使うと

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A}^2=&\left[\frac{\boldsymbol{r}}{r}-\frac{1}{\mu Ze^2}(-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p}+\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p})\right]\cdot\left[\frac{\boldsymbol{r}}{r}-\frac{1}{\mu Ze^2}(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p})\right]\\=&1-\frac{1}{\mu Ze^2}\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}+\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\right)\\&+\left(\frac{1}{\mu Ze^2}\right)^2\left(-(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L})+\mathrm{i}\hbar\underbrace{\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}}_{=0}+\mathrm{i}\hbar\underbrace{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}}_{=0}+\hbar^2p^2\right)\end{aligned} \tag{9.5.10}$$

*原著では axial vector であるが，軸性ベクトルの意味ではなく楕円の長軸方向のベクトルという意味であろう．本書では一般に使われている用語である離心ベクトルとする．

となり，ここで恒等式

$$
\begin{aligned}
\mathrm{i}\hbar\left(\boldsymbol{p}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}-\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}\right) &= \mathrm{i}\hbar\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\boldsymbol{\nabla}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}=\frac{2\hbar^2}{r}\ , \\
\frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}-\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p}\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r} &= \frac{1}{r}\boldsymbol{L}^2+\boldsymbol{L}^2\frac{1}{r}=\frac{2}{r}\boldsymbol{L}^2\ , \\
(\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p})\cdot(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}) &= \boldsymbol{L}\cdot\left[\boldsymbol{p}\times(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L})\right] \\
&= \boldsymbol{L}\cdot(\boldsymbol{p}\underbrace{\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{L}}_{=0}-p^2\boldsymbol{L})=-p^2\boldsymbol{L}^2
\end{aligned}
\tag{9.5.11}
$$

に注意すると，次の結果を得る．

$$
\begin{aligned}
\boldsymbol{A}^2 &= 1-\frac{2}{\mu Ze^2}\frac{1}{r}(\boldsymbol{L}^2+\hbar^2)+\frac{1}{(\mu Ze^2)^2}p^2(\boldsymbol{L}^2+\hbar^2) \\
&= 1+\frac{2}{\mu Z^2e^4}H(\boldsymbol{L}^2+\hbar^2)\ .
\end{aligned}
\tag{9.5.12}
$$

あるいは以下のように書ける．

$$
H=-\frac{\mu Z^2e^4}{2}\frac{1-\boldsymbol{A}^2}{\boldsymbol{L}^2+\hbar^2}\ . \tag{9.5.13}
$$

これは保存量 H，$\boldsymbol{L}$ および $\boldsymbol{A}$ の間の関係式であり，6 変数(たとえば $\boldsymbol{r}$ と $\boldsymbol{p}$ の成分は 6 個)しかないことから必ず存在しなくてはならない関係式である．

束縛状態($H'<0$)では $\boldsymbol{A}^{2'}<1$ であり，散乱状態($H'>0$)では $\boldsymbol{A}^{2'}>1$ であることに注意しよう．このことは離心ベクトル $\boldsymbol{A}$ の幾何学的な意味と一致する(問題 9-14 を参照)．

さてそれでは，$\boldsymbol{L}$ と $\boldsymbol{A}$ の 6 個の成分の間の交換関係は何だろうか？ すでに

$$
\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[L_x,L_y]=L_z\ ,\ldots \quad \text{および} \quad \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[A_x,L_y]=A_z\ ,\ldots \tag{9.5.14}
$$

などの交換関係はよく知っている．これらをまとめて書くと次のようになる．

$$
\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{L}=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{L} \quad \text{および} \quad \boldsymbol{A}\times\boldsymbol{L}+\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{A}=2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{A}\ . \tag{9.5.15}
$$

それでは $\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A}$ はどうなるだろうか？ これはベクトルであり，保存量なので $\boldsymbol{L}$，$\boldsymbol{A}$ および $\boldsymbol{L}\times\boldsymbol{A}$ の線形結合で書けるはずである．

さてここで，次の変換

$$
\boldsymbol{r}\to-\boldsymbol{r}\ ,\quad \boldsymbol{p}\to-\boldsymbol{p} \tag{9.5.16}
$$

について考えよう．これは交換関係とハミルトニアンを変えない(すでに問題 2-9 と 2-24 において，1 次元のユニタリー反転について学んだ)．この変換で各々のベクトルは

$$
\boldsymbol{L}\to\boldsymbol{L}\ ,\quad \boldsymbol{A}\to-\boldsymbol{A}\ ,\quad \boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A}\to\boldsymbol{A}\times\boldsymbol{A} \tag{9.5.17}
$$

と変換されるので，次の式の右辺で可能なものは $\boldsymbol{L}$ だけである．

$$\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{A} = \mathrm{i}\hbar C \boldsymbol{L} . \tag{9.5.18}$$

ここで C はスカラーの保存量である．この値を決めるために次の式を見てみよう．

$$\begin{aligned} \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[A_x, \boldsymbol{A}^2\right] &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[A_x, A_y^2\right] + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[A_x, A_z^2\right] \\ &= A_y C L_z + C L_z A_y - A_z C L_y - C L_y A_z . \end{aligned} \tag{9.5.19}$$

これは式(9.5.12)を使うと

$$\begin{aligned} \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[A_x, \boldsymbol{A}^2\right] &= (\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{L})_x C - C(\boldsymbol{L} \times \boldsymbol{A})_x \\ &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[A_x, \frac{2}{\mu Z^2 e^4} H \boldsymbol{L}^2\right] \\ &= \frac{2H}{\mu Z^2 e^4} \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[A_x, \boldsymbol{L}^2\right] \end{aligned} \tag{9.5.20}$$

となり，ここで

$$\begin{aligned} \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[A_x, \boldsymbol{L}^2\right] &= L_y A_z + A_z L_y - L_z A_y - A_y L_z \\ &= (\boldsymbol{L} \times \boldsymbol{A})_x - (\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{L})_x \end{aligned} \tag{9.5.21}$$

だから，式(9.5.18)の定数は $C = -2H/(\mu Z^2 e^4)$ であることがわかる．したがって交換関係は次のようになる．

$$\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{A} = \mathrm{i}\hbar \frac{-2H}{\mu Z^2 e^4} \boldsymbol{L} . \tag{9.5.22}$$

さて，ここでまだ H の固有値は知らないとして，与えられた束縛状態を構成する部分空間での H のエネルギー固有値 $H' < 0$ を

$$H' = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2\hbar^2} \frac{1}{\nu^2} \quad \text{ただし} \quad \nu > 0 \tag{9.5.23}$$

と書いておこう．これより以下の関係式が成立する．

$$\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{A} = \frac{\mathrm{i}}{\nu^2} \frac{1}{\hbar} \boldsymbol{L} \quad \text{および} \quad \boldsymbol{A}^2 = 1 - \frac{1}{\nu^2}\left(\frac{1}{\hbar^2}\boldsymbol{L}^2 + 1\right) . \tag{9.5.24}$$

ここで2個のベクトル演算子

$$\boldsymbol{J}_{1,2} = \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{L} \pm \hbar\nu \boldsymbol{A}\right) \tag{9.5.25}$$

を定義すると，元のベクトルは次のように書ける．

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{J}_1 + \boldsymbol{J}_2 , \quad \hbar\nu \boldsymbol{A} = \boldsymbol{J}_1 - \boldsymbol{J}_2 . \tag{9.5.26}$$

それでは $\boldsymbol{J}_1$ と $\boldsymbol{J}_2$ の交換関係はどうなるだろうか？ まず

$$\begin{aligned}\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[J_{1x}, J_{2y}] &= \frac{1}{4}\Big(\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\big[L_x, L_y\big] - \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\big[\hbar\nu A_x, \hbar\nu A_y\big] \\ &\qquad - \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\big[L_x, \hbar\nu A_y\big] + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\big[\hbar\nu A_x, L_y\big]\Big) \\ &= \frac{1}{4}\big(L_z - L_z - \hbar\nu A_z + \hbar\nu A_z\big) = 0 \end{aligned} \tag{9.5.27}$$

などの交換関係より $\boldsymbol{J}_1$ と $\boldsymbol{J}_2$ は**交換する**ことがわかる．また同じベクトルに対しては

$$\begin{aligned}\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[J_{1x}, J_{1y}] &= \frac{1}{4}\Big(\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\big[L_x, L_y\big] + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\big[\hbar\nu A_x, \hbar\nu A_y\big] \\ &\qquad + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\big[L_x, \hbar\nu A_y\big] + \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\big[\hbar\nu A_x, L_y\big]\Big) \\ &= \frac{1}{4}\big(L_z + L_z + \hbar\nu A_z + \hbar\nu A_z\big) = J_{1z} \end{aligned} \tag{9.5.28}$$

となり，まとめると以下の交換関係が得られる．

$$\boldsymbol{J}_1 \times \boldsymbol{J}_1 = \mathrm{i}\hbar \boldsymbol{J}_1 \quad \text{同様に} \quad \boldsymbol{J}_2 \times \boldsymbol{J}_2 = \mathrm{i}\hbar \boldsymbol{J}_2\,. \tag{9.5.29}$$

つまり $\boldsymbol{J}_1$ と $\boldsymbol{J}_2$ は 2 個の独立な角運動量となる．ただし 1 つの制限がある．それは

$$\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{L} = \frac{\boldsymbol{r}}{r}\cdot\boldsymbol{L} - \frac{1}{\mu Z e^2}(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L} - \mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p})\cdot\boldsymbol{L} = 0 \tag{9.5.30}$$

に注意すると，以下の条件であることがわかる．

$$\begin{aligned}\boldsymbol{J}_1^2 = \boldsymbol{J}_2^2 &= \frac{1}{4}\big(\boldsymbol{L}^2 + \underbrace{\hbar^2\nu^2\boldsymbol{A}^2}_{=\hbar^2\nu^2 - \boldsymbol{L}^2 - \hbar^2}\big) \\ &= \frac{1}{4}\hbar^2\big(\nu^2 - 1\big)\,. \end{aligned} \tag{9.5.31}$$

ここで $\boldsymbol{J}_1^2 = \boldsymbol{J}_2^2$ の固有値は $j(j+1)\hbar^2$ であり，大きさは $j = 0, \frac{1}{2}, 1, \ldots$ の値をとる，つまり $2j+1 = n = 1, 2, 3. \ldots$ である．したがって

$$\nu^2 = 4j(j+1) + 1 = (2j+1)^2 = n^2 \tag{9.5.32}$$

となり，再びボーアエネルギーの式が得られる．

$$H' = -\frac{\mu Z^2 e^4}{2n^2\hbar^2}\,. \tag{9.5.33}$$

これらのエネルギー固有値は，m_1 と m_2 が独立に $2j+1 = n$ 通りの値をとることに対応して縮退していることは明らかである．そして縮退度は知っているように n^2 となる．代わりに，状態を次の演算子の固有値で指定することも可能である．

$$\boldsymbol{L} = \boldsymbol{J}_1 + \boldsymbol{J}_2 \;:\quad \underbrace{|j_1 - j_2|}_{=0} \le l \le \underbrace{j_1 + j_2}_{=2j = n-1}\,. \tag{9.5.34}$$

このようにして求められた多重度は $\sum_{l=0}^{n-1}(2l+1) = n^2$ となり，もちろん一致する．

さて，$n=1$ の場合は $j=j_1=j_2=0$ であるから，基底状態 $|\ \rangle$ は

$$\boldsymbol{J}_1|\ \rangle = 0 \quad \text{および} \quad \boldsymbol{J}_2|\ \rangle = 0 \tag{9.5.35}$$

つまり

$$\boldsymbol{L}|\ \rangle = 0 \quad \text{および} \quad \boldsymbol{A}|\ \rangle = 0 \tag{9.5.36}$$

を満たすことに注意しよう．したがって状態 $|\ \rangle$ に対する波動関数 $\psi(\boldsymbol{r})$ に対しては

$$\boldsymbol{r}\times\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\boldsymbol{\nabla}\psi(\boldsymbol{r}) = 0 \quad \text{および} \quad \left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}+\frac{\hbar^2}{\mu Ze^2}\boldsymbol{\nabla}\right)\psi(\boldsymbol{r}) = 0 \tag{9.5.37}$$

が成立し，これより

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \psi(r)\,, \quad \left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}+\frac{Z}{a_0}\right)\psi(r) = 0 \tag{9.5.38}$$

となり，これを解くと

$$\psi(r) = \psi(0)\,\mathrm{e}^{-Zr/a_0} \quad \text{ただし} \quad a_0 = \frac{\hbar^2}{\mu e^2} \tag{9.5.39}$$

を得る．ここで(正の)値 $\psi(0)$ はもちろん規格化条件

$$1 = \int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})|\psi|^2 = 4\pi\big[\psi(0)\big]^2\underbrace{\int_0^\infty \mathrm{d}r\,r^2\,\mathrm{e}^{-2Zr/a_0}}_{=2(\frac{1}{2}a_0/Z)^3} = \frac{\pi a_0^3}{Z^3}\big[\psi(0)\big]^2 \tag{9.5.40}$$

から決定され，よく知られた次の基底状態の波動関数が得られる．

$$\psi_{n=1}(\boldsymbol{r}) = \pi^{-\frac{1}{2}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\mathrm{e}^{-Zr/a_0}\,. \tag{9.5.41}$$

それでは運動量空間での基底状態の波動関数 $\psi_{n=1}(\boldsymbol{p})$ はどうなるだろうか？ もちろんフーリエ変換して求めることができる．これは問題 8-7b で扱う．しかしここでは次の式

$$\left(\boldsymbol{A}+\frac{1}{\mu Ze^2}\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L}\right)|\ \rangle = \left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}+\frac{\mathrm{i}\hbar}{\mu Ze^2}\boldsymbol{p}\right)|\ \rangle = 0 \tag{9.5.42}$$

つまり

$$\left(\frac{\boldsymbol{r}}{r}+\mathrm{i}\frac{\boldsymbol{p}}{p_0}\right)|\ \rangle = 0 \quad \text{ただし} \quad p_0 = \hbar Z/a_0 = \mu Ze^2/\hbar \tag{9.5.43}$$

から $\boldsymbol{p}$ 表示では $\boldsymbol{r}\to\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{p}}$ となることを使って直接求めてみよう．ここで問題となるのは $1/r$ をどう扱うかである．さて，$|\ \rangle$ が $n=1$ のエネルギーの固有状態であることより

$$\left(\frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu}-\frac{Ze^2}{r}\right)|\ \rangle = -\frac{1}{2\mu}\left(\frac{\hbar Z}{a_0}\right)^2|\ \rangle = -\frac{p_0^2}{2\mu}|\ \rangle \tag{9.5.44}$$

が成立し

$$\frac{1}{r}|\ \rangle = \frac{1}{2\mu Ze^2}(p^2+p_0^2)|\ \rangle = \frac{1}{2\hbar p_0}(p^2+p_0^2)|\ \rangle \tag{9.5.45}$$

となるので，これを代入すると次の関係式を得る．

$$[\boldsymbol{r}(p^2+p_0^2)+2\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{p}]|\ \rangle = 0\ . \tag{9.5.46}$$

ここで $\boldsymbol{r}\to\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{p}}$ とすると

$$\left[\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{p}}(p^2+p_0^2)+2\boldsymbol{p}\right]\psi_{n=1}(\boldsymbol{p}) = 0 \tag{9.5.47}$$

または，これを書き換えた式

$$(p^2+p_0^2)^{-1}\frac{\partial}{\partial\boldsymbol{p}}(p^2+p_0^2)^2\psi_{n=1}(\boldsymbol{p}) = 0 \tag{9.5.48}$$

が得られる．したがって波動関数は

$$\psi_{n=1}(\boldsymbol{p}) \propto \frac{1}{(p^2+p_0^2)^2} \tag{9.5.49}$$

となり，$l=0$ であることから予想されるように，ベクトル $\boldsymbol{p}$ の大きさ p だけに依存し方向には依存しない．比例定数の絶対値は規格化から決めることができるが，位相はすでに $\psi_{n=1}(\boldsymbol{r})$ を正となるように決めてしまったので，任意に決めることはできない．したがって，ここでは $\boldsymbol{p}=0$ での値を次の式から決めよう．

$$\psi(\boldsymbol{p}=0) = \int\frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{r})}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}}\,\psi(\boldsymbol{r})\ . \tag{9.5.50}$$

ここで積分を実行すると

$$\begin{aligned}\psi_{n=1}(\boldsymbol{p}=0) &= 4\pi(2\pi\hbar)^{-\frac{3}{2}}\pi^{-\frac{1}{2}}\left(\frac{Z}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}}\underbrace{\int_0^\infty \mathrm{d}r\,r^2\,\mathrm{e}^{-\frac{Zr}{a_0}}}_{=2(a_0/Z)^3} \\ &= \frac{1}{\pi}\left(\frac{2a_0}{\hbar Z}\right)^{\frac{3}{2}} = \frac{1}{\pi}\left(\frac{2}{p_0}\right)^{\frac{3}{2}}\end{aligned} \tag{9.5.51}$$

となり，これより結果は次のようになる．

$$\psi_{n=1}(\boldsymbol{p}) = \frac{2}{\pi}\sqrt{2p_0^5}\,\frac{1}{(p^2+p_0^2)^2}\ . \tag{9.5.52}$$

規格化が正しいかどうかは以下のようにして確認できる．

$$\begin{aligned}1 &= \int(\mathrm{d}\boldsymbol{p})\,|\psi_{n=1}(\boldsymbol{p})|^2 = 4\pi\int_0^\infty \mathrm{d}p\,p^2\,\frac{4}{\pi^2}\frac{2p_0^5}{(p^2+p_0^2)^4}\ . \\ &\underset{\underbrace{p^2+p_0^2=p_0^2/t}}{\overset{}{=}} \frac{16}{\pi}\underbrace{\int_0^1 \mathrm{d}t\,t^{\frac{3}{2}}(1-t)^{\frac{1}{2}}}_{=\frac{3}{2}!\frac{1}{2}!/3!} = \frac{16}{\pi}\times\frac{\pi}{16}\ .\end{aligned} \tag{9.5.53}$$

ここの計算でオイラーのベータ関数の積分

$$\int_0^1 \mathrm{d}t\, t^n (1-t)^m = \frac{n!\, m!}{(n+m+1)!} \tag{9.5.54}$$

を使った．ただし $n = \frac{3}{2}$ で $m = \frac{1}{2}$ であり，さらに $(-\frac{1}{2})! = \sqrt{\pi}$ は覚えておく価値がある．

9.6　弱い外場

ここでは弱い電場と磁場(時間的空間的に一様)を加えた場合について考察しよう．これにより内部ハミルトニアンに以下の変化が加わる．

$$\delta H = -e' \boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{E} - \frac{(e/M)'}{2c} \boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{B}\,, \quad e = -|e|\,. \tag{9.6.1}$$

これは本質的には式(8.6.27)の補正の主要項である．ただしそこでは $e = |e|$ であるが，ここでは有効結合定数(電荷)として電気的相互作用では e'，磁気的相互作用では $(e/M)'$ が現れる(詳しくは問題9-18を参照)．

まず初めに8.2節よりは多少詳しく，1次の摂動論の基本について復習しておこう．まず

$$\big[E(\lambda) - H(\lambda)\big]\big|E, \gamma\big\rangle = 0 \tag{9.6.2}$$

を思い起こすと

$$\big\langle E, \gamma\big|\frac{\partial H(\lambda)}{\partial \lambda}\big|E, \gamma'\big\rangle = \frac{\partial E(\lambda)}{\partial \lambda}\delta(\gamma, \gamma') \tag{9.6.3}$$

が得られ，これに微小量 $\delta\lambda$ を掛けると次のようになることに注意しよう．

$$\big\langle E, \gamma\big|\delta H\big|E, \gamma'\big\rangle = \delta E(E, \gamma')\delta(\gamma, \gamma')\,. \tag{9.6.4}$$

クロネッカーの $\delta(\gamma, \gamma')$ が現れていることから，縮退している状態では，行列 δH を対角化するように状態を選ばなければならない．要約すると，それらは縮退している状態空間中での δH の固有ベクトルである．

$\boldsymbol{L} \cdot \boldsymbol{B}$ の固有ベクトルを見つけることは簡単であるが，$\boldsymbol{r} \cdot \boldsymbol{E}$ についてはどうだろうか？ ここで時間にあらわに依存しない任意の演算子 F，つまり $\partial F/\partial t = 0$ である場合は

$$\big\langle E, \gamma\big|\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t}\big|E, \gamma'\big\rangle = \big\langle E, \gamma\big|\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}(FH - HF)\big|E, \gamma'\big\rangle = 0 \tag{9.6.5}$$

が成立することを思い出そう．このことに注意して，まず前節で議論した離心ベクトル

$$\begin{aligned}\boldsymbol{A} &= \frac{\boldsymbol{r}}{r} - \frac{1}{2\mu Ze^2}(\boldsymbol{p}\times\boldsymbol{L} - \boldsymbol{L}\times\boldsymbol{p}) \\ &= \frac{\boldsymbol{r}}{r} - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{1}{2Ze^2}(\boldsymbol{r}\times\boldsymbol{L} - \boldsymbol{L}\times\boldsymbol{r}) \\ &\doteq \frac{\boldsymbol{r}}{r}\end{aligned} \tag{9.6.6}$$

について見てみよう．ここでドットのついた等号は，時間の全微分の項(上の式より同じエネルギー状態での期待値はゼロとなる)を除いて等しいという意味である．さて摂動の無い場合のハミルトニアン

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2\mu} - \frac{Ze^2}{r} = T + V \tag{9.6.7}$$

に対して，演算子 $\boldsymbol{r}$ は次のように書ける．

$$\frac{\boldsymbol{r}}{r} = -\frac{1}{Ze^2}\boldsymbol{r}V\,. \tag{9.6.8}$$

そこでこの V を全ハミルトニアン H を使って表すことができれば，$\boldsymbol{r}$ を $\boldsymbol{A}/H$ と時間の全微分の項(これは期待値には寄与しない)で書き直すことができる．このために，まずビリアル定理

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p} = 2T + V = 2H - V \tag{9.6.9}$$

を使う．ただし $\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}$ は対称化された $\frac{1}{2}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r})$ であることに注意して欲しい(ただしここでは特に問題とはならないのだが)．ここで

$$\frac{1}{2}(\boldsymbol{r}\cdot\boldsymbol{p}+\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}) = \mu\frac{1}{2}\left(\boldsymbol{r}\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} + \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}\cdot\boldsymbol{r}\right) = \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\frac{1}{2}\mu r^2 \tag{9.6.10}$$

より

$$-V = -2H + \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\frac{1}{2}\mu r^2 \tag{9.6.11}$$

となる．これを使うと

$$\begin{aligned}\frac{\boldsymbol{r}}{r} = \frac{1}{Ze^2}\boldsymbol{r}(-V) &= -\frac{2}{Ze^2}\boldsymbol{r}H + \frac{\boldsymbol{r}}{Ze^2}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}t^2}\frac{1}{2}\mu r^2 \\ &\doteq -\frac{2}{Ze^2}\boldsymbol{r}H + \frac{1}{2Ze^2}\underbrace{\mu\frac{\mathrm{d}^2\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t^2}}_{=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{p} = -Ze^2\boldsymbol{r}/r^3} r^2 \\ &= -\frac{2}{Ze^2}\boldsymbol{r}H - \frac{1}{2}\frac{\boldsymbol{r}}{r}\end{aligned} \tag{9.6.12}$$

となり，式(9.6.6)と組み合わせると

$$\frac{3}{2}\boldsymbol{A} \doteq -\frac{2}{Ze^2}\boldsymbol{r}H \tag{9.6.13}$$

を得る．以上より，電気的相互作用に現れる演算子は

$$\boldsymbol{r} \doteq \frac{3}{4}\frac{Ze^2}{-H}\boldsymbol{A} \tag{9.6.14}$$

と書け，摂動部分は次のようになる．

$$\delta H \to -\frac{3}{4}\frac{Ze^2}{-H}e'\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{E} - \frac{(e/M)'}{2c}\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{B}\,. \tag{9.6.15}$$

事実上，式(9.6.1)で現れる位置ベクトルの演算子 $\boldsymbol{r}$ を離心ベクトル $\boldsymbol{A}$ で書き換えたことになっている．ここで $\boldsymbol{A}$ は式(9.6.7)の摂動の無い場合のハミルトニアンと交換するので，δH をこの形で書いてある方が摂動計算には都合がよい．

主量子数が n の縮退した状態では $Ze^2/(-H') = 2n^2 a_0/Z$ となるので，摂動項は

$$\begin{aligned}\delta H &\to -\frac{3}{2}\frac{a_0}{Z}n^2 e'\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{E} - \frac{(e/M)'}{2c}\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{B} \\ &= -\frac{3ne'}{2p_0}n\hbar\boldsymbol{A}\cdot\boldsymbol{E} - \frac{(e/M)'}{2c}\boldsymbol{L}\cdot\boldsymbol{B}\end{aligned} \tag{9.6.16}$$

となり，式(9.5.26)より $\nu \to n$ とすると，この状態に対しては

$$n\hbar\boldsymbol{A} = \boldsymbol{J}_1 - \boldsymbol{J}_2\,, \quad \boldsymbol{L} = \boldsymbol{J}_1 + \boldsymbol{J}_2 \tag{9.6.17}$$

となることにも注意しなければならない．これより摂動項は以下のように書ける．

$$\begin{aligned}\delta H &\to -\frac{3ne'}{2p_0}\boldsymbol{E}\cdot(\boldsymbol{J}_1 - \boldsymbol{J}_2) - \frac{(e/M)'}{2c}\boldsymbol{B}\cdot(\boldsymbol{J}_1 + \boldsymbol{J}_2) \\ &= -\left(\frac{3ne'}{2p_0}\boldsymbol{E} + \frac{(e/M)'}{2c}\boldsymbol{B}\right)\cdot\boldsymbol{J}_1 \\ &\quad + \left(\frac{3ne'}{2p_0}\boldsymbol{E} - \frac{(e/M)'}{2c}\boldsymbol{B}\right)\cdot\boldsymbol{J}_2\,.\end{aligned} \tag{9.6.18}$$

以上より，物理的に意味のある方向は単に $\boldsymbol{E}$ や $\boldsymbol{B}$ そのものではなく，$\boldsymbol{E}$ と $\boldsymbol{B}$ の上記の2個の組み合わせである．これらの方向の $\boldsymbol{J}_1$ と $\boldsymbol{J}_2$ の固有値を $m_1\hbar$ および $m_2\hbar$ とすると，m_1 と m_2 はともに独立に $j = \frac{1}{2}(n-1)$ から $-j = -\frac{1}{2}(n-1)$ までの値をとり，全体で $(2j+1)^2 = n^2$ の状態がある．そして期待値は以下のようになる．

$$\begin{aligned}\delta E_{n,m_1,m_2} &= -\left|\frac{3ne'}{2p_0}\boldsymbol{E} + \frac{(e/M)'}{2c}\boldsymbol{B}\right|\hbar m_1 \\ &\quad + \left|\frac{3ne'}{2p_0}\boldsymbol{E} - \frac{(e/M)'}{2c}\boldsymbol{B}\right|\hbar m_2\,.\end{aligned} \tag{9.6.19}$$

一般的には，$\boldsymbol{E}$ と $\boldsymbol{B}$ が直交している場合を除くと縮退は除かれる．直交する場合は2個の合成ベクトルは同じ大きさを持ち，期待値は $m_1 - m_2$ に比例する．また磁場が $\boldsymbol{B} = 0$ で $F = |\boldsymbol{E}|$ とすると

$$\delta E = -\frac{3ne'}{2p_0}F\hbar(m_1 - m_2) = -\frac{3}{2}\frac{ne'a_0}{Z}F(m_1 - m_2) \tag{9.6.20}$$

となり，この結果は放物線座標を使った式(8.5.19)に一致する．ただし，そこでは e は $|e|$ であり，$k_{1,2} = m_{1,2} + \frac{1}{2}(n-1) = 0, 1, \ldots, n-1$ を使って書かれている．

問題

9-1　定義より直接 $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{v}_1 - \boldsymbol{v}_2$ として $\boldsymbol{p} = \mu \boldsymbol{v}$ であることを示せ．

9-2　$\boldsymbol{R}$,$\boldsymbol{r}$, $\boldsymbol{P}$, $\boldsymbol{p}$ のすべての成分の間の交換関係をきちんと証明せよ．

9-3a　2 原子分子の原子間の引力ポテンシャルは以下のように近似される．

$$V(r) = V_0 \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^2 - 2\frac{r_0}{r} \right] .$$

ここで V_0 および r_0 は現象論的な定数である．このポテンシャルのもとでの相対運動によるエネルギー固有値を求めよ．

9-3b　多くの大きな分子に対しては次の式が成り立つ．

$$\mu V_0 r_0^2 \gg \hbar^2 .$$

これに対応する小さなパラメーターでエネルギー固有値を展開し，最初の 3 項を求めよ．

9-4　粒子 2 は最初止まっている．同じ質量を持つ粒子 1 が運動量 $\boldsymbol{p}_1''$ で衝突した．衝突前の $\boldsymbol{P}$ と $\boldsymbol{p}$ はいくらか？ 衝突により相対の運動量は方向を角度 Θ 変えた．粒子 2 が最初止まっているときの散乱角である，衝突前の運動量 $\boldsymbol{p}_1''$ と衝突後の運動量 $\boldsymbol{p}_1'$ の間の角度 θ はいくらか？ 結果が明確になるように，解析的な計算を図を書いて補え．

9-5a　式(3.7.34)のルジャンドルの多項式 $\mathrm{P}_l(\zeta)$ の作り方を使って，式(9.2.5)で定義された動径部分の波動関数が

$$\mathrm{j}_l(x) = \frac{x^l}{2^l\, l!} \left(1 + \frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} \right)^l \frac{\sin x}{x}$$

となることを示せ．そして $\mathrm{j}_0(x)$ および $\mathrm{j}_1(x)$ を具体的に求めよ．

9-5b　次の式を示せ．

$$\left(\boldsymbol{\nabla}^2 + k^2 \right) \mathrm{e}^{\mathrm{i}kr\cos\theta} = 0 .$$

$\mathrm{j}_l(kr)$ のしたがう微分方程式を r の関数，つまり $x = kr$ の関数として求めよ．この微分方程式から x が小さいとき，および x が大きいときの $\mathrm{j}_l(x)$ の振る舞いについてそれぞれどんなことが言えるか？

9-5c　微分方程式を適当に変換し漸近形を比較することで，$\mathrm{j}_l(x)$ をこれと密接に関係しているベッセル関数で表した式

$$\mathrm{j}_l(x) = \sqrt{\frac{\pi}{2x}}\, \mathrm{J}_{l+\frac{1}{2}}(x)$$

を示せ．j_l は球ベッセル関数として知られる．

9-6a　階乗関数の表示の1つとして以下の式がある．

$$\frac{1}{z!} = \mathrm{e}^{\gamma z} \prod_{n=1}^{\infty} \left(1 + \frac{z}{n}\right) \mathrm{e}^{-\frac{z}{n}} \ .$$

ここでオイラー定数 $\gamma = 0.5772\cdots$ は $1! = 1$ から決まる．$z! = z\,(z-1)!$ となっていることを示せ．

9-6b　この $z!$ の表示を使って式(9.2.27)の関係を示せ．

9-7　球対称で r が大きいところで $1/r$ より速くゼロとなるポテンシャル $V(r)$ に対しては，正のエネルギー E の動径部分の波動関数 $R_l(r)$ は漸近的に以下のように書ける．

$$R_l(r) \cong \frac{1}{kr} \sin(kr - \tfrac{1}{2}\pi l + \delta_l) \ .$$

z 軸に沿って波動関数 $\mathrm{e}^{\mathrm{i}kz}$ で入射した粒子の正しい波動関数は，以下のようになることを説明せよ．

$$\psi(r,\theta) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1)\mathrm{i}^l\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\delta_l} R_l(r) \mathrm{P}_l(\cos\theta) \ .$$

これより次の式の散乱振幅 $f(\theta)$ を求めよ．

$$\psi_{\mathrm{scatt.}} \cong \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} f(\theta) \ .$$

そして単位立体角当たりの微分散乱断面積を求めよ．また全断面積を求めよ．

9-8a　波動関数 $\psi(\boldsymbol{r},t)$ は次のシュレーディンガー方程式にしたがう．

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\partial}{\partial t} \psi = \left[-\frac{\hbar^2}{2M} \boldsymbol{\nabla}^2 + V(\boldsymbol{r}) \right] \psi \ .$$

問題6-1aの，確率密度 ρ および確率の流束密度 $\boldsymbol{j}$ は以下のようになることを示せ．

$$\rho = \psi^* \psi \ , \qquad \boldsymbol{j} = \frac{1}{M} \mathrm{Re} \left(\psi^* \frac{\hbar}{\mathrm{i}} \boldsymbol{\nabla} \psi \right) \ .$$

これらは次の連続の方程式を満たすことを示せ．

$$\frac{\partial}{\partial t} \rho + \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{j} = 0 \ .$$

これより ρ と $\boldsymbol{j}$ をそれぞれ粒子の密度および粒子の流束密度と解釈できる．

9-8b　エネルギーの決まった状態では，問題9-8aの流束ベクトルは任意の閉曲面 S に対して次の式を満たす．どうしてか？

$$\int_S \mathrm{d}\boldsymbol{S} \cdot \boldsymbol{j} = 0 \ .$$

波動関数(時間因子は省略)の漸近形

$$\psi \propto \mathrm{e}^{\mathrm{i}kz} + \frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}}{r} f(\theta) \quad ただし \quad z = r\cos\theta$$

について考察する．十分大きな半径($kr \gg 1$)の球面で積分することより，全断面積は以下の式で与えられることを示せ．

$$\sigma = \frac{4\pi}{k} \operatorname{Im}\left(f(\theta = 0)\right) \ .$$

問題 9-7 で求めた $f(\theta)$ および σ について，上記の**光学定理**が成立していることを確かめよ．

9-9a 演算子に対する運動方程式を使って，時間にあらわに依存しない任意の演算子 F は次の式を満たすことを示せ．

$$\left\langle E', \gamma' \middle| F(t) \middle| E'', \gamma'' \right\rangle = \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E' - E'')t} \left\langle E', \gamma' \middle| F \middle| E'', \gamma'' \right\rangle .$$

これは $\left\langle E', \gamma'; t \middle| F(t) \middle| E'', \gamma''; t \right\rangle$ が時間 t に依存しない事実と矛盾しないか？

9-9b 摂動論: ハミルトニアンを $H = H_0 + H_1$ とし，H_1 は小さいとする．作用原理を使って，H_1 による時間変換関数の微小変化は以下のようになることを示せ．

$$\delta\langle 1|2\rangle = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar} \langle 1| \int_2^1 \mathrm{d}t \, H_1(t) |2\rangle \ .$$

9-9c 時間 t にあらわに依存しない H_1 について，H_0 の初めおよび終わりの固有状態に対して，問題 9-9b の時間変換関数

$$\langle 1|2\rangle = \left\langle E', \gamma'; t_1 \middle| E'', \gamma''; t_2 \right\rangle$$

は次の因子を持つことを示せ．

$$-\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E' - E'')t_1} - \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E' - E'')t_2}}{E' - E''} \ .$$

9-9d $T = t_1 - t_2$ が十分大きい極限では，以下のようになることを示せ．

$$\left| \frac{\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E' - E'')t_1} - \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E' - E'')t_2}}{E' - E''} \right|^2 \to \frac{2\pi}{\hbar} T \, \delta(E' - E'') \ .$$

これより $E'', \gamma'' \to E', \gamma'$ への単位時間当たりの遷移確率は次のようになる．

$$\frac{2\pi}{\hbar} \delta(E' - E'') \left| \left\langle E', \gamma' \middle| H_1 \middle| E'', \gamma'' \right\rangle \right|^2 .$$

量子論の文献では，これはフェルミの黄金律として知られている．

9-10a　散乱: ハミルトニアンを $H_0 = \boldsymbol{p}^2/(2M)$ および $H_1 = V(\boldsymbol{r})$ とする．ある運動量の状態を記述する波動関数は以下で与えられる(これと式(10.8.12)の $\phi_{\boldsymbol{p}}$ を比較せよ)．

$$\psi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}) = \sqrt{\frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{p})}{(2\pi)^3}}\ \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}} \quad ただし \quad E = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2M}\ .$$

始状態の粒子の平均の流束は次のようになる．

$$F = v|\psi_{\boldsymbol{p}''}|^2 \quad ただし \quad v = |\boldsymbol{p}''|/M\ .$$

ここで運動量空間での極座標を導入し $(\mathrm{d}\boldsymbol{p}')$ を $\mathrm{d}E'$ と立体角 $\mathrm{d}\Omega$ で書く．微分断面積は以下のように定義される．

$$\mathrm{d}\sigma = \frac{立体角\ \mathrm{d}\Omega\ への単位時間当たりの粒子数}{流束\ F}\ .$$

これは次のようになることを示せ．

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega} = \left(\frac{M}{2\pi\hbar}\right)^2 \left|\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\ \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}'-\boldsymbol{p}'')\cdot\boldsymbol{r}}V(\boldsymbol{r})\right|^2\ .$$

この式は(1次の)ボルン近似として知られている．

9-10b　V として次の遮蔽されたクーロンポテンシャルをとる．

$$V(\boldsymbol{r}) = \frac{Ze^2}{r}\,\mathrm{e}^{-r/a}\ .$$

$\mathrm{d}\sigma/\mathrm{d}\Omega$ はどうなるか？ また $a \to \infty$ の極限でどうなるか？

9-11　原理的には区別可能だが実際には区別できない2粒子の，重心系での微分散乱断面積は次のようになる．

$$|f(\Theta)|^2 + |f(\pi - \Theta)|^2\ .$$

これは式(9.4.10)の古典部分である．スピンが $\frac{1}{2}$ である2個のFD粒子の散乱について考察する．反対方向のスピンを持つ粒子の散乱に上の式を適用せよ．スピンが平行なら反対称な波動関数を用いよ．この結果と9.4節の結果を比較せよ．

9-12　水素様原子の基底状態の知られている波動関数 $\psi_{n=1}(\boldsymbol{r})$ から $\psi_{n=1}(\boldsymbol{p})$ を求めるためのフーリエ変換を実行せよ．

9-13　式(9.5.5)において，$\boldsymbol{p}$ の線形依存性を示せ．

9-14　離心率 ε の円錐曲線の極座標表示は次の式である．

$$r = \frac{a(1-\varepsilon^2)}{1-\varepsilon\cos\theta}\ .$$

a および θ の意味について述べよ．離心ベクトル $\boldsymbol{A}$ を使って上の式で与えられる古典的なケプラー*の楕円軌道を導け．ケプラーの楕円軌道を書き $\boldsymbol{A}$ を示せ．なぜ $\boldsymbol{A}$ が離心ベクトルと呼ばれるのか？

9-15　離心ベクトル: $\boldsymbol{A}$ の構造と $\boldsymbol{r}$ の時間平均の結果を使って問題 8-1d の結果 $\langle r\rangle_{n,l}$ を再現せよ．

9-16　水素様原子の $m_1 = m_2 = \frac{1}{2}(n-1)$ の状態は次の式

$$\big(J_{1x} + \mathrm{i}J_{1y}\big)\big|\ \big\rangle = 0\,, \qquad \big(J_{2x} + \mathrm{i}J_{2y}\big)\big|\ \big\rangle = 0$$

つまり

$$\big(A_x + \mathrm{i}A_y\big)\big|\ \big\rangle = 0\,, \qquad \big(L_x + \mathrm{i}L_y\big)\big|\ \big\rangle = 0$$

を満たすことを示せ．ラプラス方程式の解である調和関数の $m = l$ の状態の波動関数は，定数を除いて $(x+\mathrm{i}y)^l$ と書けるから，上記の状態の波動関数は $(x+\mathrm{i}y)^{n-1}f(r)$ に比例することを確かめよ．そしてこの離心ベクトルの性質を使って $f(r)$ を求め，規格化された波動関数を求めよ．特に主量子数 n が大きい場合，これらの状態は円リュードベリ状態と呼ばれる．

9-17　水素様原子の $n = 2$ の状態は多重度が 4 であり，大きさが $\frac{1}{2}$ の 2 個のスピンで記述される．2 個のスピンを加えると 3 重の対称な状態 $(l = 1)$ と 1 重の反対称な状態 $(l = 0)$ がある．定数を除いて $A_z\big|n = 2, l = 1, m = 0\big\rangle$ が $\big|n = 2, l = 0, m = 0\big\rangle$ である理由を説明せよ．

9-18　電荷 e, 質量 m の粒子 1 および電荷 $-Ze$, 質量 $M - m$ の粒子 2 の系に，十分弱い一様な電場と磁場を作用させる．内部運動を考慮して電気双極子モーメントに対する有効電荷 e' および磁気双極子モーメントに対する有効定数 $(e/M)'$ を求めよ．この結果を次の系に適用せよ．(a) 水素様原子のような $m/M \ll 1$ (m/M の 1 次まで) の場合，および (b) ポジトロニウムのような $M = 2m$, $Z = 1$ の場合．

9-19a　水素様原子の 4 重に縮退した $n = 2$ の状態を角運動量の固有状態で表す．$-e'Fz$ を 4×4 の行列で作れ．これの固有値と固有ベクトルを求めよ．この結果とよく知られている線形シュタルク効果の結果を比較せよ．

9-19b　$-e'Fx$ に対して，前問と同様に行列を作り固有値と固有ベクトルを求めよ．固有値は予想できるか？

9-19c　前問の計算を $-e'Fx - \frac{1}{2c}(e/M)'L_zB$ に拡張して行え．正しい結果が得られるか？

---

*Johannes KEPLER (1571–1630)

第 10 章

同種粒子

10.1 モード．生成消滅演算子

この章では，同種粒子系の代数的理論で第 2 量子化と（不正確に）呼ばれている理論を構築することにしよう．この理論については，すでに角運動量についての文脈の中で簡単に 150 ページで触れている．

単一系では，物理量 f は測定 A の完全系

$$\sum_{a'}\big|a'\big\rangle\big\langle a'\big| = 1 \tag{10.1.1}$$

を用いて表すと

$$f = \sum_{a',a''}\big|a'\big\rangle\big\langle a'\big|f\big|a''\big\rangle\big\langle a''\big| = \sum_{a',a''}\big\langle a'\big|f\big|a''\big\rangle\big|a'a''\big| \tag{10.1.2}$$

となることを思い起こそう．ここで同種な系の集まりを考え，それらを今後**粒子**と呼び，$k = 1,2,\ldots,n$ と番号を付ける．すると f と A の関係が各々の同種粒子について同じであるから，番号 k の粒子に対して f は

$$f_k = \sum_{a',a''}\underbrace{\big\langle a'_k\big|f_k\big|a''_k\big\rangle}_{=\langle a'|f|a''\rangle}\big|a'a''\big|_k \tag{10.1.3}$$

である．運動量，角運動量，運動エネルギーは **1 体**の物理量の例であり，それらは加法的に

$$F = \sum_{k=1}^{n} f_k = \sum_{a',a''}\big\langle a'\big|f\big|a''\big\rangle\underbrace{\sum_{k=1}^{n}\big|a'a''\big|_k}_{\equiv |a'a''| = |a''a'|^{\dagger}} \tag{10.1.4}$$

と表される．ここでは観測記号 $\big|a'a''\big|$ は一般化され，元のものとは性質が

$$\sum_{a'}\left|a'a'\right| = \sum_{a'}\left[\sum_{k=1}^{n}\left|a'a'\right|_k\right] = \sum_{k=1}^{n}\underbrace{\sum_{a'}\left|a'a'\right|_k}_{=1} = n \tag{10.1.5}$$

となる点で異なっている．また，積は

$$\begin{aligned}\left|a'a''\right|\left|a'''a^{\prime\mathrm{V}}\right| &= \sum_{k=1}^{n}\sum_{l=1}^{n}\left|a'a''\right|_k\left|a'''a^{\prime\mathrm{V}}\right|_l \\ &= \sum_{k\neq l}\left|a'a''\right|_k\left|a'''a^{\prime\mathrm{V}}\right|_l + \sum_{k}\underbrace{\left|a'a''\right|_k\left|a'''a^{\prime\mathrm{V}}\right|_k}_{=\delta(a'',a''')\left|a'a^{\prime\mathrm{V}}\right|_k} \\ &= \sum_{k\neq l}\left|a'a''\right|_k\left|a'''a^{\prime\mathrm{V}}\right|_l + \delta(a'',a''')\left|a'a^{\prime\mathrm{V}}\right| \end{aligned} \tag{10.1.6}$$

となり，同様に $a' \leftrightarrow a''', a'' \leftrightarrow a^{\prime\mathrm{V}}, k \leftrightarrow l$ と置き換えると

$$\left|a'''a^{\prime\mathrm{V}}\right|\left|a'a''\right| = \sum_{k\neq l}\left|a'''a^{\prime\mathrm{V}}\right|_l\left|a'a''\right|_k + \delta(a',a^{\prime\mathrm{V}})\left|a'''a''\right| \tag{10.1.7}$$

となることにも注意しよう．上の2つの式において $k \neq l$ の項は同じである．なぜなら異なった粒子，すなわち異なった自由度に結び付いた演算子は交換するからである．それゆえ，これらの差をとると

$$\left[\left|a'a''\right|,\left|a'''a^{\prime\mathrm{V}}\right|\right] = \delta(a'',a''')\left|a'a^{\prime\mathrm{V}}\right| - \delta(a',a^{\prime\mathrm{V}})\left|a'''a''\right| \tag{10.1.8}$$

となる．ここで，$a' = a''$ として和をとると，

$$\left[n,\left|a'''a^{\prime\mathrm{V}}\right|\right] = \left|a'''a^{\prime\mathrm{V}}\right| - \left|a'''a^{\prime\mathrm{V}}\right| = 0 \tag{10.1.9}$$

となり，矛盾のない結果を得ることに注意しよう．また

$$\left[\left|a'a'\right|,\left|a''a''\right|\right] = \delta(a',a'')\left|a'a''\right| - \delta(a',a'')\left|a''a'\right| = 0 \tag{10.1.10}$$

も成り立つ．

n 粒子状態と1粒子状態を区別するために，これからは1粒子状態をモードと呼ぶことにする．したがって，n 粒子の **1** つをモード a'' から取り去り，モード a' に入れる測定を記号化して

$$\left|a'a''\right| = \sum_{k=1}^{n}\left|a'a''\right|_k \tag{10.1.11}$$

と記すことにする（これは，右から左に読む仕方である）．または，積で表された形では

$$\left|a'a''\right| = \begin{pmatrix} a' \text{ 粒子を} \\ \text{生成する} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} a'' \text{ 粒子を} \\ \text{消滅する} \end{pmatrix} = \psi(a')^\dagger\psi(a'') \tag{10.1.12}$$

となる．ここで $\psi(a')^\dagger$ および $\psi(a'')$ は，それぞれ $\left|a'\right\rangle$ および $\left\langle a''\right|$ の一般化であり，

1.3 節ですでに導入された（そのときには，左から右に読んでいた）．$\psi(a')^\dagger$ を生成演算子，$\psi(a'')$ を消滅演算子と呼び，いずれも一種の昇降演算子である．表現(10.1.12)は，関係

$$\left|a'a''\right|^\dagger = \left|a''a'\right| \tag{10.1.13}$$

と矛盾しないことに注意しよう．

消滅演算子 $\psi(a'')$ は n 粒子の状態 $\left|n\right\rangle$ に作用すると $n-1$ 粒子の状態を作り出し，生成演算子 $\psi(a')^\dagger$ は $n-1$ 粒子の状態に作用して n 粒子の状態を作り出すという意味を各々の演算子に与えることで，決まった粒子数という制約から解放される．これからは，n は負でない任意の整数とし N を粒子数演算子とすると，次の対応が成り立つ．

$$\sum_{a'}\left|a'a'\right| = n \rightarrow \sum_{a'} \psi(a')^\dagger \psi(a') = N\,. \tag{10.1.14}$$

ここで N の固有値は

$$N' = n = 0, 1, 2, \ldots \tag{10.1.15}$$

である．これをモード a' の粒子数演算子

$$\psi(a')^\dagger \psi(a') = N(a') \tag{10.1.16}$$

に拡張することは自然の成り行きである．式(10.1.10)の結果，交換関係

$$\left[N(a'), N(a'')\right] = 0 \tag{10.1.17}$$

が成り立つからこの拡張に矛盾が生じることはなく，さらにこれらのすべての固有値を同時に

$$N(a')' = n(a') = 0, 1, 2, \ldots \tag{10.1.18}$$

と特定することができる．実際，状態はこれらの固有値の集合で指定されて

$$\left|\{n(a')\}\right\rangle = \left|n_1, n_2, \ldots\right\rangle \tag{10.1.19}$$

と表すことができる．ここで，$n_1, n_2, \ldots$ はモードの順序付けられたラベルと各モードを占拠する粒子数を表している．このように各モードに決まった数の粒子がいる状態は，しばしばフォック状態と呼ばれる．

$\psi(a')$ と $N(a'')$ の物理的意味は次の式から読みとることができる．

$$N(a'')\psi(a')\left|\{n\}\right\rangle = \left\{ \begin{array}{ll} n(a'')\psi(a')\left|\{n\}\right\rangle & (a'' \neq a') \\ \left[n(a') - 1\right]\psi(a')\left|\{n\}\right\rangle & (a'' = a') \end{array} \right\}$$

$$= \psi(a')\left[n(a'') - \delta(a', a'')\right]\left|\{n\}\right\rangle$$

$$= \psi(a')\left[N(a'') - \delta(a', a'')\right]\left|\{n\}\right\rangle\,. \tag{10.1.20}$$

この結果から演算子の関係式

$$N(a'')\psi(a') = \psi(a')\big[N(a'') - \delta(a', a'')\big] \tag{10.1.21}$$

が得られ，これはすなわち交換関係

$$\big[\psi(a'), N(a'')\big] = \delta(a', a'')\psi(a') \tag{10.1.22}$$

である．生成演算子 $\psi(a')^\dagger$ について同様に扱うと関係式

$$N(a'')\psi(a')^\dagger = \psi(a')^\dagger\big[N(a'') + \delta(a', a'')\big] \tag{10.1.23}$$

が得られ，これは次の交換関係となる．

$$\big[N(a''), \psi(a')^\dagger\big] = \delta(a', a'')\psi(a')^\dagger \ . \tag{10.1.24}$$

当然のことではあるが，この式は ψ に関する式(10.1.22)のエルミート共役である．

一般的な交換関係(10.1.8)は生成消滅演算子を用いて

$$\begin{aligned}\big[\psi(a')^\dagger\psi(a''), \psi(a''')^\dagger\psi(a^{\prime\mathrm{v}})\big] =&\delta(a'', a''')\psi(a')^\dagger\psi(a^{\prime\mathrm{v}})\\ &- \delta(a', a^{\prime\mathrm{v}})\psi(a''')^\dagger\psi(a'')\end{aligned} \tag{10.1.25}$$

と書くことができる．この交換関係と，上記の結果の整合性を検証してみよう．この式で $a''' = a^{\prime\mathrm{v}}$ とおくと

$$\big[\psi(a')^\dagger\psi(a''), N(a''')\big] = \delta(a'', a''')\psi(a')^\dagger\psi(a'') - \delta(a', a''')\psi(a')^\dagger\psi(a'') \tag{10.1.26}$$

となり，一方，式(10.1.22)と(10.1.24)より

$$\begin{aligned}\big[\psi(a')^\dagger\psi(a''), N(a''')\big] &= \psi(a')^\dagger\big[\psi(a''), N(a''')\big] + [\psi(a')^\dagger, N(a''')]\psi(a'')\\ &= \delta(a'', a''')\psi(a')^\dagger\psi(a'') - \delta(a', a''')\psi(a')^\dagger\psi(a'')\end{aligned} \tag{10.1.27}$$

となり，同じ結果が得られ矛盾はない．

2個の粒子を2つの異なる順序で付加して得られる状態

$$\psi(a')^\dagger\psi(a'')^\dagger\big|\{n\}\big\rangle \quad と \quad \psi(a'')^\dagger\psi(a')^\dagger\big|\{n\}\big\rangle \tag{10.1.28}$$

を考えることが，次の決定的な一歩となる．この2つの状態は物理的には区別することができず，したがって比例関係

$$\psi(a')^\dagger\psi(a'')^\dagger = C(a', a'')\psi(a'')^\dagger\psi(a')^\dagger \tag{10.1.29}$$

で結び付き，さらに比例係数は

$$\big|C(a', a'')\big|^2 = 1\ , \quad C(a', a'')^* = \frac{1}{C(a', a'')} \tag{10.1.30}$$

を満たさなければならない．順番を 2 回変えると元に戻るから，

$$C(a',a'')C(a'',a')=1 \tag{10.1.31}$$

が成り立つ．したがって，式(10.1.29)のエルミート共役をとり，a' と a'' を交換すると

$$\psi(a')\psi(a'')=C(a'',a')^*\psi(a'')\psi(a') \tag{10.1.32}$$

を得る．

ここで交換関係

$$\begin{aligned}\big[\psi(a'),N(a'')\big]&=\psi(a')\psi(a'')^\dagger\psi(a'')-\psi(a'')^\dagger\psi(a'')\psi(a')\\&=\Big(\psi(a')\psi(a'')^\dagger-C(a'',a')\psi(a'')^\dagger\psi(a')\Big)\psi(a'')\\&=\delta(a',a'')\psi(a'')\end{aligned} \tag{10.1.33}$$

に注意すると，関係式

$$\psi(a')\psi(a'')^\dagger-C(a'',a')\psi(a'')^\dagger\psi(a')=\delta(a',a'') \tag{10.1.34}$$

を導出できる．次に，この式を一般的な交換関係(10.1.25)に代入するに当たって，次の式

$$\begin{aligned}\psi(a')^\dagger\psi(a'')\psi(a''')^\dagger\psi(a^{\prime\mathrm{v}})&=\psi(a')^\dagger\big[C(a''',a'')\psi(a''')^\dagger\psi(a'')\\&\qquad+\delta(a'',a''')\big]\psi(a^{\prime\mathrm{v}})\\&=\delta(a'',a''')\psi(a')^\dagger\psi(a^{\prime\mathrm{v}})\\&\qquad+C(a',a''')C(a''',a'')\psi(a''')^\dagger\psi(a')^\dagger\psi(a'')\psi(a^{\prime\mathrm{v}})\end{aligned} \tag{10.1.35}$$

および次の式

$$\begin{aligned}\psi(a''')^\dagger\psi(a^{\prime\mathrm{v}})\psi(a')^\dagger\psi(a'')&=\delta(a',a^{\prime\mathrm{v}})\psi(a''')^\dagger\psi(a'')\\&\qquad+C(a',a^{\prime\mathrm{v}})C(a^{\prime\mathrm{v}},a'')\psi(a''')^\dagger\psi(a')^\dagger\psi(a'')\psi(a^{\prime\mathrm{v}})\end{aligned} \tag{10.1.36}$$

に注意すると，交換関係(10.1.25)を満足するためには

$$C(a',a''')C(a''',a'')=C(a',a^{\prime\mathrm{v}})C(a^{\prime\mathrm{v}},a'') \tag{10.1.37}$$

が成り立つ必要があることがわかる．この関係式および式(10.1.30)と(10.1.31)が満たされるためには，係数 $C(a',a'')$ は

$$C(a',a'')=\pm\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi(a')\,-\,\mathrm{i}\varphi(a'')} \tag{10.1.38}$$

と表されなければならないと結論される．

しかし実は符号のみが意味がある．なぜならば，もし $\varphi(a')$ がゼロでないならば，生成演算子と消滅演算子を再定義して

$$'\psi(a') = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi(a')N}\psi(a')\,, \qquad '\psi(a')^\dagger = \psi(a')^\dagger\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi(a')N} \tag{10.1.39}$$

とすることでこの因子を吸収できるからである．まず ψ, $\psi^\dagger$ の物理的な意味を表現している交換関係

$$\begin{aligned} \psi(a')\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi N} &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi(N+1)}\psi(a')\,, \\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi N}\psi(a')^\dagger &= \psi(a')^\dagger\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi(N+1)} \end{aligned} \tag{10.1.40}$$

に注意しよう．これらは式(10.1.22)および(10.1.24)を一般化したものである．すると

$$\begin{aligned} '\psi(a')\,'\psi(a'') &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi(a')N}\psi(a')\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi(a'')N}\psi(a'') \\ &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi(a')+\mathrm{i}\varphi(a'')N}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi(a'')}\psi(a')\psi(a'') \\ &= \pm\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi(a')+\mathrm{i}\varphi(a'')N}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi(a')}\psi(a'')\psi(a') \\ &= \pm\,'\psi(a'')\,'\psi(a') \end{aligned} \tag{10.1.41}$$

が成り立ち，さらに

$$\begin{aligned} &'\psi(a')\,'\psi(a'')^\dagger \mp\, '\psi(a'')^\dagger\,'\psi(a') \\ &\quad = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi(a')N}\psi(a')\psi(a'')^\dagger\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi(a'')N} \\ &\qquad \mp\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi(a')N}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi(a')}\psi(a'')^\dagger\psi(a')\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi(a'')}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi(a'')N} \end{aligned} \tag{10.1.42}$$

より

$$\begin{aligned} &'\psi(a')\,'\psi(a'')^\dagger \mp\, '\psi(a'')^\dagger\,'\psi(a') \\ &\quad = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi(a')N}\Big[\underbrace{\psi(a')\psi(a'')^\dagger - C(a'',a')\psi(a'')^\dagger\psi(a')}_{=\delta(a',a'')}\Big]\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi(a'')N} \\ &\quad = \delta(a',a'') \end{aligned} \tag{10.1.43}$$

が成り立つからである．

要約すると，同種粒子には 2 つの型がある．その 1 つはボース・アインシュタイン(BE)統計(ψ が交換する)にしたがう粒子で**ボース粒子**と呼ばれ，もう 1 つはフェルミ・ディラック(FD)統計(ψ が反交換する)にしたがう粒子で**フェルミ粒子**と呼ばれる．以下の表は対応する交換関係を示している．

BE 統計	FD 統計	
$\big[\psi(a'),\psi(a'')\big]=0$	$\big\{\psi(a'),\psi(a'')\big\}=0$	
$\big[\psi(a')^\dagger,\psi(a'')^\dagger\big]=0$	$\big\{\psi(a')^\dagger,\psi(a'')^\dagger\big\}=0$	
$\big[\psi(a'),\psi(a'')^\dagger\big]=\delta(a',a'')$	$\big\{\psi(a'),\psi(a'')^\dagger\big\}=\delta(a',a'')$	(10.1.44)

後の便利のために記号

$$[\{A,B\}] = \begin{cases} [A,B] = AB - BA & \text{BE 記号} \\ \{A,B\} = AB + BA & \text{FD 記号} \end{cases} \tag{10.1.45}$$

を導入すると，表(10.1.44)の3対の関係は以下のように表される．

$$[\{\psi(a'),\psi(a'')\}] = 0\,, \qquad [\{\psi(a')^\dagger,\psi(a'')^\dagger\}] = 0\,,$$
$$[\{\psi(a'),\psi(a'')^\dagger\}] = \delta(a',a'')\,. \tag{10.1.46}$$

10.2　1体および2体の演算子

BE系では，自由度を非エルミート演算子 $(y, y^\dagger)$ で記述できることがわかる．そして $N(a')$ の固有値は確かに

$$N(a')' = \big(\psi(a')^\dagger\psi(a')\big)' = n(a') = 0, 1, 2, \ldots \tag{10.2.1}$$

となり，BE統計と矛盾しない．FD統計では $N(a')$ の固有値はどうなるであろうか？この場合には

$$\begin{aligned} N(a')\big(1 - N(a')\big) &= \psi(a')^\dagger\psi(a')\big(1 - \psi(a')^\dagger\psi(a')\big) \\ &= \psi(a')^\dagger \underbrace{\psi(a')\psi(a')}_{=0} \psi(a')^\dagger = 0 \end{aligned} \tag{10.2.2}$$

より，固有値

$$N(a')' = n(a') = 0, 1 \tag{10.2.3}$$

を得る．もし2つの粒子が同じモードを占拠するならば状態は対称的であるはずだから，このことはFD統計では起こり得ない．これがパウリの排他律であり，1つのモードを占める粒子は，さらに他の粒子がこのモードに加わることを排除する．

測定をするとちょうど**2**種類の結果が得られるような自由度1の系としては，スピン $\frac{1}{2}$ の系がよく知られている．生成消滅演算子を以下のように

$$\psi = \tfrac{1}{2}(\sigma_1 - \mathrm{i}\sigma_2)\,, \qquad \psi^\dagger = \tfrac{1}{2}(\sigma_1 + \mathrm{i}\sigma_2) \tag{10.2.4}$$

と表し，逆に σ_1, σ_2 を求め，さらにに σ_3 を導入し

$$\sigma_1 = \psi + \psi^\dagger\,, \quad \sigma_2 = \mathrm{i}\psi - \mathrm{i}\psi^\dagger\,, \quad \sigma_3 = \frac{1}{\mathrm{i}}\sigma_1\sigma_2 = \psi^\dagger\psi - \psi\psi^\dagger \tag{10.2.5}$$

とする．ψ, $\psi^\dagger$ の反交換関係から次の基本的な代数関係が簡単に確かめられる．

$$\sigma_1^2 = 1\,, \quad \sigma_2^2 = 1\,, \quad \sigma_3^2 = 1\,,$$
$$\{\sigma_1,\sigma_2\} = 0\,, \quad \{\sigma_2,\sigma_3\} = 0\,, \quad \{\sigma_3,\sigma_1\} = 0\,. \tag{10.2.6}$$

これはパウリスピン演算子の持つ代数関係である．数演算子は

$$N = \psi^\dagger\psi = \tfrac{1}{2}\{\psi^\dagger, \psi\} + \tfrac{1}{2}[\psi^\dagger, \psi] = \tfrac{1}{2} + \tfrac{1}{2}\sigma_3 \tag{10.2.7}$$

となり，確かに固有値 $N' = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} = 1$ および $N' = \frac{1}{2} - \frac{1}{2} = 0$ を持っている．

しかし，異なったモードに対する FD 演算子は異なった自由度であるはずであるが，交換せずにむしろ反交換するという事実はどう考えればよいだろうか？ このことについては問題 10-2 で考察するが，ここでは互いに交換する異なった自由度に結びついた σ を用いて考えることにする．モードに番号を付け，$a'' > a'$ ならば a' の後に a'' があるとする．そして以下のように演算子を定義しよう．

$$\psi(a') = \left[\prod_{a'''(>a')} \sigma_3(a''')\right] \frac{\sigma_1 - \mathrm{i}\sigma_2}{2}(a') \,,$$
$$\psi(a')^\dagger = \left[\prod_{a'''(>a')} \sigma_3(a''')\right] \frac{\sigma_1 + \mathrm{i}\sigma_2}{2}(a') \,. \tag{10.2.8}$$

同じモードに対する演算子の積，すなわち，$\psi(a')\psi(a')$，$\psi(a')\psi(a')^\dagger$ および $\psi(a')^\dagger\psi(a')^\dagger$ はすべて以前と同じであることは明らかである．なぜならば次の式が成り立つからである．

$$\left[\prod_{a'''(>a')} \sigma_3(a''')\right]^2 = \prod_{a'''(>a')} \left[\sigma_3(a''')\right]^2 = 1 \,. \tag{10.2.9}$$

次に $a' < a''$ の場合に以下の 2 つの表式

$$\psi(a')\psi(a'') = \left[\prod_{a'''(>a')} \sigma_3(a''')\right] \frac{\sigma_1 - \mathrm{i}\sigma_2}{2}(a') \left[\prod_{a'''(>a'')} \sigma_3(a''')\right] \frac{\sigma_1 - \mathrm{i}\sigma_2}{2}(a'') \tag{10.2.10}$$

と

$$\psi(a'')\psi(a') = \left[\prod_{a'''(>a'')} \sigma_3(a''')\right] \frac{\sigma_1 - \mathrm{i}\sigma_2}{2}(a'') \left[\prod_{a'''(>a')} \sigma_3(a''')\right] \frac{\sigma_1 - \mathrm{i}\sigma_2}{2}(a') \tag{10.2.11}$$

を調べることにする．ここで，左側の $\frac{1}{2}(\sigma_1 - \mathrm{i}\sigma_2)$ を右側の同類の項の隣にくるように移動する．これを実行するときに，$\frac{1}{2}(\sigma_1 - \mathrm{i}\sigma_2)(a')$ は $a''' > a'' > a'$ の条件のもとで積 $\prod \sigma_3(a''')$ を通過するが，a' は積の中に無いから何事も起こらない．一方，$\frac{1}{2}(\sigma_1 - \mathrm{i}\sigma_2)(a'')$ は $a''' > a'$ の積を通過するが，$a'' > a'$ であるからこの積は $\sigma_3(a'')$ を含み，したがって符号の反転が起こり

$$\psi(a'')\psi(a') = -\psi(a')\psi(a'') \quad \text{すなわち} \quad \{\psi(a'), \psi(a'')\} = 0 \tag{10.2.12}$$

が成り立つ．同様に，式(10.1.44)に示された反交換関係が証明される．

以上のことすべてを考慮すると，任意の 1 体の演算子(10.1.4)を

$$F = \sum_{a',a''} \psi(a')^\dagger \langle a'|f|a''\rangle \psi(a'') \tag{10.2.13}$$

と表現できることが導かれる．単一の系(粒子)を考えることにして，波動関数 $\psi(a')$ で記述される状態で f の期待値を書き下すと

$$\langle f\rangle = \langle\ |f|\ \rangle = \sum_{a',a''} \underbrace{\langle\ |a'\rangle}_{=\psi(a')^\dagger} \langle a'|f|a''\rangle \underbrace{\langle a''|\ \rangle}_{=\psi(a'')} \tag{10.2.14}$$

となる．任意の粒子数に関与する F は，あたかも波動関数(第 1 量子化)を演算子(第 2 量子化)に格上げすることで作りだされるように見える．ここに,「第 2 量子化」という名称の起源がある．

このような記述法は 3.4 節ですでに出会っているが，そこでは別の記法(無次元変数)で角運動量演算子が

$$\boldsymbol{J} = y^\dagger \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma} y = \sum_{\sigma',\sigma''} y(\sigma')^\dagger \langle \sigma'|\tfrac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}|\sigma''\rangle y(\sigma'') \tag{10.2.15}$$

と書かれ，演算子 y, $y^\dagger$ の代数は

$$\big[y(\sigma), y(\sigma')\big] = 0\,, \quad \big[y^\dagger(\sigma), y^\dagger(\sigma')\big] = 0\,,$$
$$\big[y(\sigma), y^\dagger(\sigma')\big] = \delta(\sigma, \sigma') \tag{10.2.16}$$

で与えられる．任意の角運動量はスピン $\frac{1}{2}$ の BE 集合であると言えることがここに至って理解できるだろう．これに関連して，$\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}$ が角運動量の交換関係にしたがうから $\boldsymbol{J}$ も同様であることを注意しておこう．この事実は公式

$$\big[F, G\big] = \sum_{a',a''} \psi(a')^\dagger \langle a'|[f,g]|a''\rangle \psi(a'') \tag{10.2.17}$$

の 1 つの適用例である．この式は $\psi(a')^\dagger$, $\psi(a'')$ の交換関係から導かれ，交換関係

$$\left[\sum_k f_k, \sum_l g_l\right] = \sum_k \left[f_k, g_k\right] \tag{10.2.18}$$

を第 2 量子化で表現したものである．

個々の積 FG についてどのようになっているだろうか？ 第 1 量子化では

$$FG = \sum_k f_k \sum_l g_l = \sum_k f_k g_k + \sum_{k\neq l} f_k g_l \tag{10.2.19}$$

と 1 体の演算子と 2 体の演算子の和で表され，第 2 量子化では

$$FG = \sum_{a',a''} \psi(a')^\dagger \langle a'|f|a''\rangle \psi(a'') \times \sum_{a''',a^{\prime V}} \psi(a''')^\dagger \langle a'''|g|a^{\prime V}\rangle \psi(a^{\prime V}) \tag{10.2.20}$$

と表される．ここで前の節で求めた式(10.1.35)（$C(a',a''')C(a''',a'') = (\pm 1)^2 = 1$ とおいた）

$$\psi(a')^\dagger \psi(a'')\psi(a''')^\dagger \psi(a^{\prime V}) = \delta(a'',a''')\psi(a')^\dagger \psi(a^{\prime V}) + \psi(a')^\dagger \psi(a''')^\dagger \psi(a^{\prime V})\psi(a'') \tag{10.2.21}$$

を用いると

$$FG = \sum_{a',a''} \psi(a')^\dagger \langle a'|fg|a''\rangle \psi(a'') + \sum_{a',\dots,a^{\prime V}} \psi(a')^\dagger \psi(a''')^\dagger \langle a'|f|a''\rangle \langle a'''|g|a^{\prime V}\rangle \psi(a^{\prime V})\psi(a'') \tag{10.2.22}$$

となる．1 体の演算子は 1 つの ψ（そして 1 つの $\psi^\dagger$）を持ち，それが寄与するためには 1 粒子だけでよい．2 体の演算子は 2 つの ψ（と 2 つの $\psi^\dagger$）を持ち，少なくとも 2 粒子がその機能を果たすために必要とされる．

もっと一般的に，2 体の演算子は第 1 量子化で

$$F = \frac{1}{2}\sum_{k \neq l} f_{kl} \quad ただし \quad f_{kl} = f_{lk} \tag{10.2.23}$$

と表される．観測記号を用いると

$$\begin{aligned} f_{kl} &= \sum_{a',\dots,a^{\prime V}} |a'a'|_k |a'''a'''|_l f_{kl} |a^{\prime V}a^{\prime V}|_l |a''a''|_k \\ &= \sum_{a',\dots,a^{\prime V}} \underbrace{\langle a_l'''|\langle a_k'|f_{kl}|a_k''\rangle|a_l^{\prime V}\rangle}|a'a''|_k |a'''a^{\prime V}|_l \end{aligned} \tag{10.2.24}$$

$$= \langle a',a'''|f|a'',a^{\prime V}\rangle = \langle a''',a'|f|a^{\prime V},a''\rangle$$

であるから，2 体の演算子は

$$F = \frac{1}{2}\sum_{a',\dots,a^{\prime V}} \langle a'a'''|f|a''a^{\prime V}\rangle \sum_{k\neq l} |a'a''|_k |a'''a^{\prime V}|_l \tag{10.2.25}$$

と表され，生成消滅演算子を用いて書き換えると

$$\begin{aligned} \sum_{k\neq l} |a'a''|_k |a'''a^{\prime V}|_l &= |a'a''||a'''a^{\prime V}| - \delta(a'',a''')|a'a^{\prime V}| \\ &= \psi(a')^\dagger \psi(a'')\psi(a''')^\dagger \psi(a^{\prime V}) - \delta(a'',a''')\psi(a')^\dagger \psi(a^{\prime V}) \\ &= \psi(a')^\dagger \psi(a''')^\dagger \psi(a^{\prime V})\psi(a'') \end{aligned} \tag{10.2.26}$$

となり，結局，第 2 量子化で表した 2 体の演算子の一般形は

$$F = \frac{1}{2} \sum_{a',\ldots,a^{\prime\mathrm{V}}} \psi(a')^\dagger \psi(a''')^\dagger \langle a'a'''|f|a''a^{\prime\mathrm{V}}\rangle \psi(a^{\prime\mathrm{V}})\psi(a'') \tag{10.2.27}$$

であることがわかる．この結果を眺めてみれば，k 体の演算子は

$$\begin{aligned} F = \frac{1}{k!} \sum_{a^{(1)},\ldots,a^{(2k)}} & \psi(a^{(1)})^\dagger \cdots \psi(a^{(2k-1)})^\dagger \\ & \times \langle a^{(1)},\ldots,a^{(2k-1)}|f|a^{(2)},\ldots,a^{(2k)}\rangle \\ & \times \psi(a^{(2k)}) \cdots \psi(a^{(2)}) \end{aligned} \tag{10.2.28}$$

と表されることは容易に理解できるだろう．

10.3　多粒子状態

色々なモードに定まった数の粒子が占拠する状態の固有ベクトル(10.1.19)はどのように表されるだろうか？ BE 角運動量の場合の明らかな一般化によって，この状態の固有ベクトルとして表式

$$|\{n\}\rangle = \prod_{a'} \frac{\left(\psi(a')^\dagger\right)^{n(a')}}{\sqrt{n(a')!}} |0\rangle \tag{10.3.1}$$

を得る．ここで

$$\psi(a')|0\rangle = 0 \qquad (\text{任意の } a') \tag{10.3.2}$$

で定義されるベクトル $|0\rangle$ は粒子が存在しない状態すなわち真空を記述している．また

$$\psi(a')^\dagger|\{n\}\rangle = |\{n+1(a')\}\rangle\sqrt{n(a')+1} \tag{10.3.3}$$

および($\psi \to \partial/\partial\psi^\dagger$)

$$\psi(a')|\{n\}\rangle = |\{n-1(a')\}\rangle\sqrt{n(a')} \tag{10.3.4}$$

であることがわかる．この式を言葉で表すと次のようになる．

$$\left\{\begin{matrix} \psi(a')^\dagger \\ \psi(a') \end{matrix}\right\} \text{ を } |\{n\}\rangle \text{ へ作用} = \text{モード } a' \text{ の中の粒子数を} \left\{\begin{matrix} 1\text{ つ増加する．} \\ 1\text{ つ減少する．} \end{matrix}\right\} \tag{10.3.5}$$

これらの式を組み合わせると，もちろん

$$\begin{aligned} (\psi^\dagger\psi)(a')|\{n\}\rangle &= |\{n\}\rangle n(a')\,, \\ (\psi\psi^\dagger)(a')|\{n\}\rangle &= |\{n\}\rangle\big(n(a')+1\big) \end{aligned} \tag{10.3.6}$$

となる．

おなじ構成法が FD 統計に対しても適用できる．ただし $n(a')=0,1$ という制限が付き，したがって階乗は常に 1（$n(a')!=1$）である．さらに積の順序が重要であり，ある決まった標準の順序を採用する必要がある．結局のところ固有ベクトルは占拠されたモード上での単なる積で

$$\big|\{n\}\big\rangle = \prod_{(n(a')=1)} \psi(a')^\dagger\big|0\big\rangle \quad \text{ただし} \quad \psi(a')\big|0\big\rangle = 0 \tag{10.3.7}$$

と表される．そこで，消滅生成演算子のこの状態に対する作用は

$$\begin{aligned}\psi(a')\big|\{n\}\big\rangle &= \big|\{n-1(a')\}\big\rangle(-1)^{n(<a')}\sqrt{n(a')}\\ &= \begin{cases}\big|\{n-1(a')\}\big\rangle(-1)^{n(<a')} & (n(a')=1),\\ 0 & (n(a')=0)\end{cases}\end{aligned} \tag{10.3.8}$$

および

$$\begin{aligned}\psi(a')^\dagger\big|\{n\}\big\rangle &= \big|\{n+1(a')\}\big\rangle(-1)^{n(<a')}\sqrt{1-n(a')}\\ &= \begin{cases}0 & (n(a')=1),\\ \big|\{n+1(a')\}\big\rangle(-1)^{n(<a')} & (n(a')=0)\end{cases}\end{aligned} \tag{10.3.9}$$

となる．ここで符号はモード $a''<a'$ の粒子数 $n(<a')$ に依存する．すなわち，式 (10.3.1) で $\psi(a')^\dagger$ の左にある $\psi(a'')^\dagger$ の数

$$n(<a') = \sum_{a''(<a')} n(a'') \tag{10.3.10}$$

に依存する．

10.4　動力学の基礎

これまでは運動学だけであり，時間には無関係に演算子やベクトルを扱ってきた．これからは関心を動力学に向けよう．基本的な変数は $\psi(a',t)$ および $\psi(a',t)^\dagger$ である．これらは作用原理にどのように適合するだろうか？ BE 統計では簡単である．なぜなら $\psi(a',t)$ および $\psi(a',t)^\dagger$ はちょうど q,p 型の変数を結合する非エルミート演算子の例になっているからである．ラグランジアン

$$L = \sum_{a'} \mathrm{i}\hbar\psi(a',t)^\dagger\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\psi(a',t) - H \tag{10.4.1}$$

から，運動方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\psi(a',t) = \frac{\partial H}{\partial\psi(a',t)^\dagger} \tag{10.4.2}$$

および

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\psi(a',t)^\dagger = -\frac{\partial H}{\partial\psi(a',t)} \tag{10.4.3}$$

が導かれ，これらは互いにエルミート共役であり，また生成演算子は

$$G = G_\psi + G_t = \sum_{a'} \mathrm{i}\hbar\psi(a',t)^\dagger\delta\psi(a',t) - H\delta t \tag{10.4.4}$$

であることを我々は知っている．

もしハミルトニアンがちょうど 1 体の演算子で

$$H = \sum_{a',a''} \psi(a',t)^\dagger\langle a'|h|a''\rangle\psi(a'',t) \tag{10.4.5}$$

と表されるならば，運動方程式として

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\psi(a',t) = \sum_{a''}\langle a'|h|a''\rangle\psi(a'',t) \tag{10.4.6}$$

を得る．この式を簡潔に表すと

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\psi = h\psi \tag{10.4.7}$$

と線形演算子方程式となり，シュレーディンガー方程式と本質的に同じである．この動力学をスピン $\frac{1}{2}$ の BE 集合としてとらえた角運動量の例で説明しよう．

10.5　一般スピン動力学の例

1 つの例として，時間的に変化する磁場 $\boldsymbol{B}(t)$ と磁気モーメント $\gamma\boldsymbol{S}$ で結合している任意のスピン $\boldsymbol{S}$ の運動を扱うことにする．ハミルトニアン

$$H = -\gamma\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B}(t) \tag{10.5.1}$$

は，$\boldsymbol{B}(t)$ を通してあらわに時間に依存している．任意の角運動量に関して $\delta\boldsymbol{J} = (\mathrm{i}\hbar)^{-1}[\boldsymbol{J},\delta\boldsymbol{\omega}\cdot\boldsymbol{J}] = \delta\boldsymbol{\omega}\times\boldsymbol{J}$ が成り立つことを用いると，運動方程式

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{S}}{\mathrm{d}t} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{S},H] = \gamma\boldsymbol{S}\times\boldsymbol{B} \tag{10.5.2}$$

が導かれる．右辺はもちろん磁場 $\boldsymbol{B}$ 中で磁気モーメント $\gamma\boldsymbol{S}$ が受けるトルクである．

$\boldsymbol{S}^2$ が保存するから，s（ただし，$\boldsymbol{S}^{2'} = s(s+1)\hbar^2$; $s = 0, \frac{1}{2}, 1, \ldots$）の決まった値に対して式(10.5.2)を解くことも考えられるが，しかしすべての s の値を一度に取り扱う方がより簡単で，しかもより系統的である．任意の $\boldsymbol{S}$ をスピン $\frac{1}{2}$ の BE 集合と見なし，3.4 節の記法を用いて

$$\frac{1}{\hbar}\boldsymbol{S} = y^\dagger\frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}y\,, \qquad y = \begin{pmatrix} y_+ \\ y_- \end{pmatrix}, \quad y^\dagger = (y_+^\dagger, y_-^\dagger) \tag{10.5.3}$$

と表す．するとハミルトニアン(10.5.1)は

$$H = -\hbar\gamma y^\dagger \frac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}y \tag{10.5.4}$$

と表され，1体の演算子の表式(10.4.5)で $\psi(a',t) \to y_\pm$ と置き換えた形をしている．BE系の観点から見ると，運動方程式は

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}y = \frac{1}{\hbar}\frac{\partial H}{\partial y^\dagger} = -\gamma\tfrac{1}{2}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}y \tag{10.5.5}$$

となり，ちょうど2つ(ラベルを ± とする)の線形演算子方程式から成る．

運動方程式が線形であるから，2×2 行列 $\mathcal{U}$ を用いて

$$y(t_1) = \mathcal{U}y(t_2) \tag{10.5.6}$$

と表すことができる．したがって，エルミート共役をとると

$$y(t_1)^\dagger = \left[\mathcal{U}y(t_2)\right]^\dagger = y(t_2)^\dagger\mathcal{U}^{\mathrm{T}*} \tag{10.5.7}$$

と，転置(T)行列の複素共役(∗)をとった行列が関与する．この式を具体的に成分で表すと

$$\begin{aligned} y_\sigma(t_1) &= \sum_{\sigma'=\pm}\mathcal{U}_{\sigma\sigma'}y_{\sigma'}(t_2)\,, \\ y_\sigma(t_1)^\dagger &= \sum_{\sigma'=\pm}y_{\sigma'}(t_2)^\dagger(\mathcal{U}^{\mathrm{T}})^*_{\sigma'\sigma} = \sum_{\sigma'=\pm}\mathcal{U}^*_{\sigma\sigma'}y_{\sigma'}(t_2)^\dagger \end{aligned} \tag{10.5.8}$$

となる．交換関係は

$$\begin{aligned} \left[y_\sigma(t_1), y_{\sigma'}(t_1)^\dagger\right] = \delta_{\sigma\sigma'} &= \left[\sum_{\sigma''}\mathcal{U}_{\sigma\sigma''}y_{\sigma''}(t_2), \sum_{\sigma'''}y^\dagger_{\sigma'''}(t_2)\left(\mathcal{U}^{\mathrm{T}*}\right)_{\sigma'''\sigma'}\right] \\ &= \sum_{\sigma'',\sigma'''}\mathcal{U}_{\sigma\sigma''}\underbrace{\left[y_{\sigma''}(t_2), y^\dagger_{\sigma'''}(t_2)\right]}_{=\delta_{\sigma''\sigma'''}}\left(\mathcal{U}^{\mathrm{T}*}\right)_{\sigma'''\sigma'} \\ &= (\mathcal{U}\mathcal{U}^{\mathrm{T}*})_{\sigma\sigma'} \end{aligned} \tag{10.5.9}$$

となり，したがって

$$\mathcal{U}\mathcal{U}^{\mathrm{T}*} = 1 \tag{10.5.10}$$

が成り立たなければならないから，$\mathcal{U}$ はユニタリー行列である．

この系の動的な発展は時間の変換関数 $\langle y^{\dagger\prime}, t_1|y'', t_2\rangle$ で記述される．ここでたとえば $y^{\dagger\prime}$ に対する依存性を考えれば十分であり，まず

$$\delta\langle y^{\dagger\prime}, t_1| = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle y^{\dagger\prime}, t_1|G_{y^\dagger} \tag{10.5.11}$$

とすると，

$$G_{y^\dagger} = -\mathrm{i}\hbar\,\delta y^{\dagger\prime}\,y \tag{10.5.12}$$

(式(7.1.5)を参照)となり，したがって

$$\delta\langle y^{\dagger\prime},t_1|y'',t_2\rangle=\langle y^{\dagger\prime},t_1|\delta y^{\dagger\prime}y(t_1)|y'',t_2\rangle=\langle y^{\dagger\prime},t_1|\delta y^{\dagger\prime}\mathcal{U}\underbrace{y(t_2)}_{\downarrow\, y''}|y'',t_2\rangle \tag{10.5.13}$$

であるから，まとめ直すと

$$\delta\log\langle y^{\dagger\prime},t_1|y'',t_2\rangle=\delta\left[y^{\dagger\prime}\mathcal{U}y''\right] \tag{10.5.14}$$

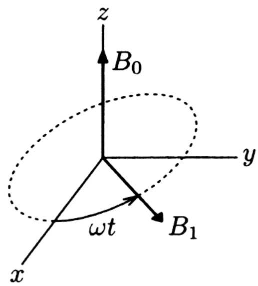
となる．この方程式を解いて得られた表式

$$\langle y^{\dagger\prime},t_1|y'',t_2\rangle=\mathrm{e}^{y^{\dagger\prime}\mathcal{U}y''} \tag{10.5.15}$$

が正しく規格化されていることは，$\langle y^{\dagger\prime}=0|$ が角運動量ゼロの状態($\langle y^{\dagger\prime}=0|\boldsymbol{S}=0)$ であり，何も起こらないことから理解できる．

すべての情報は 2×2 の行列 $\mathcal{U}$ に含まれ，この行列は式(10.5.5)を解いて式(10.5.6)の形式に解を表すことで得ることができる．特殊な例として，回転磁場を

$$\boldsymbol{B}=B_1\left(\boldsymbol{e}_x\cos(\omega t)+\boldsymbol{e}_y\sin(\omega t)\right)+B_0\boldsymbol{e}_z \tag{10.5.16}$$



と選ぶことにすると，

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma}\cdot\boldsymbol{B}&=B_1\left(\sigma_x\cos(\omega t)+\sigma_y\sin(\omega t)\right)+B_0\sigma_z\\&=B_1\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\sigma_z\frac{\omega t}{2}}\sigma_x\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\sigma_z\frac{\omega t}{2}}+B_0\sigma_z\end{aligned} \tag{10.5.17}$$

となる．したがって

$$y(t)=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\omega t}{2}\sigma_z}\overline{y}(t) \tag{10.5.18}$$

と表すと，運動方程式(10.5.5)は

$$\left(\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}+\frac{\omega}{2}\sigma_z\right)\overline{y}=-\gamma\frac{1}{2}(B_1\sigma_x+B_0\sigma_z)\overline{y} \tag{10.5.19}$$

すなわち

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{y}=-\gamma\frac{1}{2}\left[B_1\sigma_x+(B_0+\omega/\gamma)\,\sigma_z\right]\overline{y} \tag{10.5.20}$$

となる．ここで B と θ を

$$B=\sqrt{B_1^2+(B_0+\omega/\gamma)^2}\,,$$

$$B\sin\theta=B_1\,,\quad B\cos\theta=B_0+\omega/\gamma \tag{10.5.21}$$

と定義すると，

$$B_1\sigma_x+\bigl(B_0+\omega/\gamma\bigr)\sigma_z=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\theta}{2}\sigma_y}B\sigma_z\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\theta}{2}\sigma_y} \tag{10.5.22}$$

と表すことができる．そこで，

$$\overline{y}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\theta}{2}\sigma_y}\overline{\overline{y}} \tag{10.5.23}$$

とおくと，方程式(10.5.20)は

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\overline{\overline{y}}=-\gamma B\frac{1}{2}\sigma_z\overline{\overline{y}} \tag{10.5.24}$$

となり，この方程式を解いて

$$\overline{\overline{y}}(t_1)=\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma B\frac{1}{2}\sigma_z(t_1-t_2)}\overline{\overline{y}}(t_2) \tag{10.5.25}$$

を得る．

以上の結果を1つにまとめると

$$\begin{aligned}y(t_1)&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\omega t_1}{2}\sigma_z}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\theta}{2}\sigma_y}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma B\frac{1}{2}\sigma_z(t_1-t_2)}\overline{\overline{y}}(t_2)\\&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\omega t_1}{2}\sigma_z}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\theta}{2}\sigma_y}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma B\frac{1}{2}\sigma_z(t_1-t_2)}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\theta}{2}\sigma_y}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\omega t_2}{2}\sigma_z}y(t_2)\\&=\mathcal{U}y(t_2)\end{aligned} \tag{10.5.26}$$

となり，

$$\mathcal{U}=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\omega t_1}{2}\sigma_z}\overline{\mathcal{U}}(t_1-t_2)\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\omega t_2}{2}\sigma_z} \tag{10.5.27}$$

を得る．ここで，

$$\begin{aligned}\overline{\mathcal{U}}(T)&=\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{\theta}{2}\sigma_y}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\gamma B\frac{1}{2}\sigma_z T}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{\theta}{2}\sigma_y}\\&=\cos(\tfrac{1}{2}\gamma BT)+\mathrm{i}\sin(\tfrac{1}{2}\gamma BT)\bigl(\sigma_z\cos\theta+\sigma_x\sin\theta\bigr)\end{aligned} \tag{10.5.28}$$

とした．ユニタリー行列

$$\mathcal{U}=\begin{pmatrix}\mathcal{U}_{++} & \mathcal{U}_{+-}\\ \mathcal{U}_{-+} & \mathcal{U}_{--}\end{pmatrix} \tag{10.5.29}$$

の行列要素を具体的に表すと，$T=t_1-t_2$ として以下のようになる．

$$\begin{aligned}
\mathcal{U}_{++} &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{1}{2}\omega T}\left[\cos(\tfrac{1}{2}\gamma BT) + \mathrm{i}\cos\theta\,\sin(\tfrac{1}{2}\gamma BT)\right] ,\\
\mathcal{U}_{--} &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{1}{2}\omega T}\left[\cos(\tfrac{1}{2}\gamma BT) - \mathrm{i}\cos\theta\,\sin(\tfrac{1}{2}\gamma BT)\right] = \mathcal{U}_{++}^* ,\\
\mathcal{U}_{+-} &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\frac{1}{2}\omega(t_1+t_2)}\mathrm{i}\sin\theta\,\sin(\tfrac{1}{2}\gamma BT) ,\\
\mathcal{U}_{-+} &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}\frac{1}{2}\omega(t_1+t_2)}\mathrm{i}\sin\theta\,\sin(\tfrac{1}{2}\gamma BT) = -\mathcal{U}_{+-}^* .
\end{aligned} \tag{10.5.30}$$

次に，3.4 節の方法を適用して，展開式

$$\langle y^{\dagger\prime}, t_1 | y'', t_2\rangle = \mathrm{e}^{y^{\dagger\prime}\mathcal{U}y''} = \sum_{n=0}^{\infty}\frac{1}{n!}(y^{\dagger\prime}\mathcal{U}y'')^n \tag{10.5.31}$$

の各項をスピン状態の波動関数を用いて表そう．任意のスピン s の波動関数は

$$\begin{aligned}
\langle y^{\dagger\prime}|s,m\rangle &= \frac{(y_+^{\dagger\prime})^{s+m}(y_-^{\dagger\prime})^{s-m}}{\sqrt{(s+m)!(s-m)!}}\\
\langle s,m|y''\rangle &= \frac{(y_+'')^{s+m}(y_-'')^{s-m}}{\sqrt{(s+m)!(s-m)!}}
\end{aligned} \tag{10.5.32}$$

と表される．ここで

$$s+m = n_+ , \qquad s-m = n_- \tag{10.5.33}$$

および

$$n = 2s = 0, 1, 2, \ldots \tag{10.5.34}$$

である．したがって，スピン s の時間変換関数は

$$\frac{1}{n!}(y^{\dagger\prime}\mathcal{U}y'')^{2s} = \sum_m \langle y^{\dagger\prime}|s,m\rangle\langle s,m;t_1|s,m';t_2\rangle^{\boldsymbol{B}}\langle s,m'|y''\rangle \tag{10.5.35}$$

と表され，$\mathcal{U}$ の 4 個の行列要素を用いて望みの確率振幅を得ることができる．たとえば $s=\frac{1}{2}$ の場合には

$$\langle y^{\dagger\prime}|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\rangle = y_+^{\dagger\prime} , \quad \langle y^{\dagger\prime}|\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}\rangle = y_-^{\dagger\prime} , \ \ldots \tag{10.5.36}$$

から直ちに

$$\langle \tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\sigma;t_1|\tfrac{1}{2},\tfrac{1}{2}\sigma';t_2\rangle^{\boldsymbol{B}} = \mathcal{U}_{\sigma\sigma'} \tag{10.5.37}$$

を得る．特に時間 T で $\frac{1}{2}\leftrightarrow -\frac{1}{2}$ の遷移確率は

$$p(\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}) = |\mathcal{U}_{+-}|^2 = |\mathcal{U}_{-+}|^2 = \sin^2\theta\,\sin^2(\tfrac{1}{2}\gamma BT) \tag{10.5.38}$$

となる．この確率は 0 と 1 の間を変化する関数 $\sin^2(\frac{1}{2}\gamma BT)$ のために時間的に振動することに注意しよう．遷移確率の最大値は

$$p(\tfrac{1}{2},-\tfrac{1}{2}) \le \sin^2\theta = \left(\frac{B_1}{B}\right)^2 = \frac{(\gamma B_1)^2}{(\omega+\gamma B_0)^2 + (\gamma B_1)^2} \tag{10.5.39}$$

で与えられ，特に条件

$$\omega = -\gamma B_0 \tag{10.5.40}$$

が成り立つ場合に 1 に達する．この式は回転場と，場 B_0 による角運動量の回転との間の**共鳴**条件を表している．さらに，共鳴では確率が 0 から 1 に変化するに要する時間は

$$\Delta T = \frac{\pi}{\gamma B_1} \tag{10.5.41}$$

で与えられる．

これより，B_1 が小さくなるほど，半値幅 $\gamma B_1 = \Delta\omega$ が小さくなり共鳴は鋭くなるが，遷移が完了するに要する時間 $\Delta T = \pi/\Delta\omega$ は長くなる．$s > \frac{1}{2}$ に対しては問題 10-4 を参照．

10.6　一般の動力学

交換関係

$$\big[\psi(a'), \psi(a'')\big] = 0\,, \qquad \big[\psi(a')^\dagger, \psi(a'')^\dagger\big] = 0\,,$$
$$\big[\psi(a'), \psi(a'')^\dagger\big] = \delta(a', a'') \tag{10.6.1}$$

にしたがう BE 系の場合には，すべての演算子 $\psi,\psi^\dagger$ と**交換**する無限小変位 $\delta\psi(a')$, $\delta\psi(a')^\dagger$ を用いる．たとえば

$$\big[\delta\psi(a'), \psi(a'')^\dagger\big] = 0 \tag{10.6.2}$$

であるから，交換関係(10.6)はこの変位を行った後にも維持される．それゆえ**反交換**関係にしたがう FD 系に対しても，類推としてすべての ψ, $\psi^\dagger$ と**反交換**する演算子の変位を用いて

$$\big\{\delta\psi(a'), \psi(a'')\big\} = 0\,, \quad \big\{\delta\psi(a'), \psi(a'')^\dagger\big\} = 0\,, \ \ldots \tag{10.6.3}$$

が成り立つとする．ところで，このように完全に反交換する量は存在するだろうか？ここで

$$\psi(a') = \left[\prod_{a'''(>a')} \sigma_3(a''')\right] \frac{1}{2}(\sigma_1 - \mathrm{i}\sigma_2)(a')\,,$$
$$\psi(a')^\dagger = \left[\prod_{a'''(>a')} \sigma_3(a''')\right] \frac{1}{2}(\sigma_1 + \mathrm{i}\sigma_2)(a') \tag{10.6.4}$$

であることを思い出そう．これらすべての演算子および互いに反交換する量は何だろうか？ それは **すべての** σ_3 の積

$$\prod_{a''} \sigma_3(a'') \tag{10.6.5}$$

である．

ここで，ラグランジアン

$$L = \sum_{a'} \mathrm{i}\hbar\psi(a',t)^\dagger \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\psi(a',t) - H \tag{10.6.6}$$

で記述される動力学は，BE 系だけでなく，FD 系も含んでいることを認めることにしたい．統計の区別は $\delta\psi,\delta\psi^\dagger$ の性質に暗に含まれている．まず，作用演算子

$$W_{12} = \int_2^1 \mathrm{d}t\, L = \int\Bigl(\sum_{a'} \mathrm{i}\hbar\psi^\dagger \mathrm{d}\psi - H\mathrm{d}t\Bigr) \tag{10.6.7}$$

から始めて，この変分を計算すると次の式を得る．

$$\begin{aligned}\delta W_{12} &= \int \mathrm{d}\Bigl(\sum_{a'} \mathrm{i}\hbar\psi^\dagger\delta\psi - H\delta t\Bigr)\\ &\quad + \int\Bigl(\sum_{a'} \mathrm{i}\hbar\delta\psi^\dagger \mathrm{d}\psi - \sum_{a'} \mathrm{i}\hbar \mathrm{d}\psi^\dagger\delta\psi - \delta H\mathrm{d}t + \mathrm{d}H\delta t\Bigr)\\ &= G_1 - G_2\,. \end{aligned} \tag{10.6.8}$$

したがって，$G = G_\psi + G_t$ は

$$G_\psi = \mathrm{i}\hbar\sum_{a'} \psi(a',t)^\dagger\delta\psi(a',t) \quad \text{および} \quad G_t = -H\delta t \tag{10.6.9}$$

で与えられる．G_ψ が ψ の変位の生成演算子であるという意味は，無限小ユニタリー変換

$$\begin{aligned}\delta\psi(a',t) &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\bigl[\psi(a',t), G_\psi\bigr] = \sum_{a''}\bigl[\psi(a',t), \psi(a'',t)^\dagger\delta\psi(a'',t)\bigr]\,,\\ 0 &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\bigl[\psi(a',t)^\dagger, G_\psi\bigr] = \sum_{a''}\bigl[\psi(a',t)^\dagger, \psi(a'',t)^\dagger\delta\psi(a'',t)\bigr]\end{aligned} \tag{10.6.10}$$

によって理解できる．BE 統計では $\delta\psi$ はすべての ψ, $\psi^\dagger$ と交換するから，たとえば

$$\bigl[\psi, \psi^\dagger\delta\psi\bigr] = \bigl[\psi, \psi^\dagger\bigr]\delta\psi \tag{10.6.11}$$

などが成り立ち，その結果，交換関係は

$$\bigl[\psi(a',t), \psi(a'',t)^\dagger\bigr] = \delta(a',a'')\,, \quad \bigl[\psi(a',t)^\dagger, \psi(a'',t)^\dagger\bigr] = 0 \tag{10.6.12}$$

であると結論できる．FD 統計では $\delta\psi$ はすべての ψ, $\psi^\dagger$ と反交換するので，たとえば

$$\begin{aligned}\bigl[\psi, \psi^\dagger\delta\psi\bigr] &= \psi\psi^\dagger\delta\psi - \psi^\dagger\delta\psi\psi = \psi\psi^\dagger\delta\psi + \psi^\dagger\psi\delta\psi\\ &= \bigl\{\psi, \psi^\dagger\bigr\}\delta\psi\end{aligned} \tag{10.6.13}$$

などが成り立ち，その結果として反交換関係

$$\{\psi(a',t),\psi(a'',t)^\dagger\}=\delta(a',a'')\ ,$$
$$\{\psi(a',t)^\dagger,\psi(a'',t)^\dagger\}=0\ ,\quad \{\psi(a',t),\psi(a'',t)\}=0 \tag{10.6.14}$$

が導かれる．

作用原理のもう1つの結論は，表式

$$\delta H(\psi,\psi^\dagger,t)=\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}\delta t+\mathrm{i}\hbar\sum_{a'}\left(\delta\psi(a',t)^\dagger\frac{\mathrm{d}\psi(a',t)}{\mathrm{d}t}-\frac{\mathrm{d}\psi(a',t)^\dagger}{\mathrm{d}t}\delta\psi(a',t)\right) \tag{10.6.15}$$

であり，これは $G_t=-H\delta t$ の意味を考慮すると，任意の演算子 $F(\psi,\psi^\dagger,t)$ の時間微分

$$\frac{\mathrm{d}F}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial F}{\partial t}+\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[F,H] \tag{10.6.16}$$

を作り出す．再びこれら両方から

$$\frac{\mathrm{d}H}{\mathrm{d}t}=\frac{\partial H}{\partial t} \tag{10.6.17}$$

を得る．ここで $F=G_\psi$ とすると

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}G_\psi-\frac{\partial}{\partial t}G_\psi=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[G_\psi,H]=-\delta_\psi H \tag{10.6.18}$$

であるから，

$$\delta_\psi H=-\mathrm{i}\hbar\sum_{a'}\frac{\mathrm{d}\psi(a',t)^\dagger}{\mathrm{d}t}\delta\psi(a',t)-\mathrm{i}\hbar\sum_{a'}\psi(a',t)^\dagger\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}-\frac{\partial}{\partial t}\right)\delta\psi(a',t) \tag{10.6.19}$$

となる．矛盾無く成り立つためには

$$\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}-\frac{\partial}{\partial t}\right)\delta\psi(a',t)=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[\delta\psi(a',t),H\right]=0 \tag{10.6.20}$$

であることが要請される．この条件はBE系では自明に満足されているが，FD系ではハミルトニアン H が ψ と $\psi^\dagger$ の偶関数でなければならないことを求めている．もちろん，これまで取り扱ってきた H は1体の演算子 $[\psi^\dagger\cdots\psi]$ と2体の演算子 $[\psi^\dagger\psi^\dagger\cdots\psi\psi]$ から成り，この範疇に属している．

左および右微分を明示する記号を用いると，両方の型の運動方程式は

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\psi(a',t)=\frac{\partial_\mathrm{l}H}{\partial\psi(a',t)^\dagger}\ ,$$
$$-\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\psi(a',t)^\dagger=\frac{\partial_\mathrm{r}H}{\partial\psi(a',t)} \tag{10.6.21}$$

と表され，これらは互いにエルミート共役である．

10.7 場の演算子

離散的な指標も便利ではあるが，3 次元空間を運動し位置 $\boldsymbol{r}$（および，たとえばスピン）で特定される粒子を記述できるようにすることが望まれる．そこで，離散的なスピン指標は存在しても必要があるまでは書かないという了解のもとに，$\psi(a',t) \to \psi(\boldsymbol{r},t)$ と置き換える．すると時空の演算子値関数を扱うことになり，これを場の演算子と呼ぶ．ここで，

$$\sum_{a'} \to \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}) \tag{10.7.1}$$

と置き換えると，ラグランジアンは

$$L = \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\, \mathrm{i}\hbar\psi(\boldsymbol{r},t)^\dagger \frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t) - H \tag{10.7.2}$$

となり，これより生成演算子

$$G_\psi = \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\, \mathrm{i}\hbar\psi(\boldsymbol{r},t)^\dagger \delta\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{10.7.3}$$

が導かれ，無限小ユニタリー変換は

$$\begin{aligned}\delta\psi(\boldsymbol{r},t) &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\big[\psi(\boldsymbol{r},t), G_\psi\big] = \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\big[\psi(\boldsymbol{r},t), \psi(\boldsymbol{r}',t)^\dagger\delta\psi(\boldsymbol{r}',t)\big]\,, \\ 0 &= \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\big[\psi(\boldsymbol{r},t)^\dagger, G_\psi\big] = \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\,\big[\psi(\boldsymbol{r},t)^\dagger, \psi(\boldsymbol{r}',t)^\dagger\delta\psi(\boldsymbol{r}',t)\big]\end{aligned} \tag{10.7.4}$$

となる．ここで 2 つの統計性を同時に扱うために式(10.1.45)で導入された記法 $[\{\ \}]$ を用いると

$$\begin{aligned}\delta\psi(\boldsymbol{r},t) &= \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\,\big[\{\psi(\boldsymbol{r},t), \psi(\boldsymbol{r}',t)^\dagger\}\big]\,\delta\psi(\boldsymbol{r}',t)\,, \\ 0 &= \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\,\big[\{\psi(\boldsymbol{r},t)^\dagger, \psi(\boldsymbol{r}',t)^\dagger\}\big]\,\delta\psi(\boldsymbol{r}',t)\end{aligned} \tag{10.7.5}$$

となり，これより交換関係

$$\begin{gathered}\big[\{\psi(\boldsymbol{r},t), \psi(\boldsymbol{r}',t)^\dagger\}\big] = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\,, \\ \big[\{\psi(\boldsymbol{r},t)^\dagger, \psi(\boldsymbol{r}',t)^\dagger\}\big] = 0\,, \qquad \big[\{\psi(\boldsymbol{r},t), \psi(\boldsymbol{r}',t)\}\big] = 0\end{gathered} \tag{10.7.6}$$

が導かる．これらは式(10.1.46)を場の演算子に適用したものである．

ハミルトニアン H に関しては，まず 1 体の項は

$$H^{(1)} = \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}')(\mathrm{d}\boldsymbol{r}'')\,\psi(\boldsymbol{r}',t)^\dagger\big\langle\boldsymbol{r}'\big|h(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)\big|\boldsymbol{r}''\big\rangle\psi(\boldsymbol{r}'',t) \tag{10.7.7}$$

であるが，ここで

$$\big\langle\boldsymbol{r}'\big|h(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p},t)\big|\boldsymbol{r}''\big\rangle = h\Big(\boldsymbol{r}', \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\boldsymbol{\nabla}', t\Big)\delta(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}'') \tag{10.7.8}$$

を用いるといくぶん簡単になり

$$H^{(1)} = \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\, \psi(\boldsymbol{r},t)^\dagger h\Big(\boldsymbol{r}, \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\boldsymbol{\nabla}, t\Big)\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{10.7.9}$$

となる．2体の項(2体のポテンシャルエネルギーをモデルとする)は

$$\begin{aligned} H^{(2)} = \frac{1}{2}\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\cdots(\mathrm{d}\boldsymbol{r}'^{\mathrm{V}})\, \psi(\boldsymbol{r}',t)^\dagger \psi(\boldsymbol{r}''',t)^\dagger \\ \times \big\langle \boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}''' \big| v(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2) \big| \boldsymbol{r}'', \boldsymbol{r}'^{\mathrm{V}} \big\rangle \\ \times\, \psi(\boldsymbol{r}'^{\mathrm{V}},t)\psi(\boldsymbol{r}'',t) \end{aligned} \tag{10.7.10}$$

であり，ここで

$$\big\langle \boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}''' \big| v(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2) \big| \boldsymbol{r}'', \boldsymbol{r}'^{\mathrm{V}} \big\rangle = \delta(\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r}'')\delta(\boldsymbol{r}''' - \boldsymbol{r}'^{\mathrm{V}})v(\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r}''') \tag{10.7.11}$$

を用いるとさらに簡潔に

$$H^{(2)} = \frac{1}{2}\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})(\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\, \psi(\boldsymbol{r},t)^\dagger \psi(\boldsymbol{r}',t)^\dagger v(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}',t)\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{10.7.12}$$

と表される．式(10.2.23)での $f_{kl} = f_{kl}$ は，対称性 $v(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') = v(\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r})$ に置き換わる．作用原理は(δt の寄与を省略して)

$$\delta H = \mathrm{i}\hbar \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}) \left[\delta\psi(\boldsymbol{r},t)^\dagger \frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)}{\partial t} - \frac{\partial\psi(\boldsymbol{r},t)^\dagger}{\partial t}\delta\psi(\boldsymbol{r},t)\right] \tag{10.7.13}$$

を与える．$\psi^\dagger$ に関する左汎関数微分，および ψ に関する右汎関数微分を表式

$$\delta H(\psi^\dagger, \psi) = \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}) \left[\delta\psi(\boldsymbol{r},t)^\dagger \frac{\delta_{\mathrm{l}} H}{\delta\psi(\boldsymbol{r},t)^\dagger} + \frac{\delta_{\mathrm{r}} H}{\delta\psi(\boldsymbol{r},t)}\delta\psi(\boldsymbol{r},t)\right] \tag{10.7.14}$$

で定義する．汎関数微分を用いると運動方程式は

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t) &= \frac{\delta_{\mathrm{l}} H}{\delta\psi(\boldsymbol{r},t)^\dagger}\,, \\ -\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t)^\dagger &= \frac{\delta_{\mathrm{r}} H}{\delta\psi(\boldsymbol{r},t)} \end{aligned} \tag{10.7.15}$$

の形で与えられ，これらは式(10.6.21)を連続な場合に拡張したものである．ハミルトニアンが $H = H^{(1)} + H^{(2)}$ の場合には，変分

$$\begin{aligned} \frac{\delta_{\mathrm{l}} H}{\delta\psi(\boldsymbol{r},t)^\dagger} &= h\Big(\boldsymbol{r}, \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\boldsymbol{\nabla}, t\Big)\psi(\boldsymbol{r},t) \\ &\quad + \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\, \psi(\boldsymbol{r}',t)^\dagger v(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}',t)\, \psi(\boldsymbol{r},t) \end{aligned} \tag{10.7.16}$$

を注意深く眺めることにより，ψ の運動方程式は

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t) = \left[h\Big(\boldsymbol{r}, \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\boldsymbol{\nabla}, t\Big) + \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\, \psi(\boldsymbol{r}',t)^\dagger v(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}',t)\right]\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{10.7.17}$$

となることがわかる．

10.8　相互作用しない粒子

最初に最も簡単な問題を調べよう．それは相互作用しない粒子の集まりで，$v=0, h=\boldsymbol{p}^2/(2M)$ であるから，場の演算子は方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t}\psi(\boldsymbol{r},t)=\frac{1}{2M}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\boldsymbol{\nabla}\right)^2\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{10.8.1}$$

にしたがう．$\psi(\boldsymbol{r},t_1)$ と $\psi(\boldsymbol{r}',t_2)$ の関係は何だろうか？ 我々はこれらに関してすべてを知っている．今回は ψ が数値的な波動関数ではなく演算子であるという事実以外には，何も変わらない．したがって，波動関数の場合と同様に次の式

$$\psi(\boldsymbol{r},t_1)=\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\left\langle\boldsymbol{r},t_1\middle|\boldsymbol{r}',t_2\right\rangle\psi(\boldsymbol{r}',t_2) \tag{10.8.2}$$

が成り立つ．ここで

$$\left\langle\boldsymbol{r},t_1\middle|\boldsymbol{r}',t_2\right\rangle=\int\frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{p})}{(2\pi\hbar)^3}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_{\boldsymbol{p}}(t_1-t_2)} \tag{10.8.3}$$

は，式(5.4.14)の時間変換関数であり，さらに

$$E_{\boldsymbol{p}}=\frac{\boldsymbol{p}^2}{2M} \tag{10.8.4}$$

である．

時間変換関数 $\left\langle\psi^{\dagger\prime},t_1\middle|\psi'',t_2\right\rangle$ が量子数 $\psi^{\dagger\prime}$ にどのように依存するかを調べたい．まず，式(10.7.3)

$$G_\psi=\mathrm{i}\hbar\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,\psi(\boldsymbol{r},t)^\dagger\delta\psi(\boldsymbol{r},t) \tag{10.8.5}$$

を思い起こそう．この式のエルミート共役をとると $G_{\psi^\dagger}$ は

$$\begin{aligned}G_{\psi^\dagger}&=G_\psi-\delta\left(\mathrm{i}\hbar\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,\psi(\boldsymbol{r},t)^\dagger\psi(\boldsymbol{r},t)\right)\\&=-\mathrm{i}\hbar\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,\delta\psi(\boldsymbol{r},t)^\dagger\psi(\boldsymbol{r},t)\end{aligned} \tag{10.8.6}$$

となる．そこで

$$\begin{aligned}\delta_{\psi^{\dagger\prime}}\left\langle\psi^{\dagger\prime},t_1\middle|\psi'',t_2\right\rangle&=\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\left\langle\psi^{\dagger\prime}\middle|G_{\psi^\dagger}(t_1)\middle|\psi'',t_2\right\rangle\\&=\left\langle\psi^{\dagger\prime},t_1\right|\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,\delta\psi(\boldsymbol{r})^{\dagger\prime}\psi(\boldsymbol{r},t_1)\left|\psi'',t_2\right\rangle\end{aligned} \tag{10.8.7}$$

であり，ここで式(10.8.2)を用いると

$$\psi(\boldsymbol{r},t_1)\left|\psi'',t_2\right\rangle\to\left|\psi'',t_2\right\rangle\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\left\langle\boldsymbol{r},t_1\middle|\boldsymbol{r}',t_2\right\rangle\psi(\boldsymbol{r}')'' \tag{10.8.8}$$

となるから，これより

$$\delta_{\psi^{\dagger\prime}}\log\left\langle\psi^{\dagger\prime},t_1\middle|\psi'',t_2\right\rangle=\delta_{\psi^\dagger}\left(\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})(\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\,\psi(\boldsymbol{r})^{\dagger\prime}\left\langle\boldsymbol{r},t_1\middle|\boldsymbol{r}',t_2\right\rangle\psi(\boldsymbol{r}')''\right) \tag{10.8.9}$$

となる．この方程式を解いて

$$\langle \psi^{\dagger\prime}, t_1 | \psi'', t_2 \rangle = \mathrm{e}^{\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})(\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\, \psi(\boldsymbol{r})^{\dagger\prime} \langle \boldsymbol{r}, t_1 | \boldsymbol{r}', t_2 \rangle \psi(\boldsymbol{r}')''} \tag{10.8.10}$$

を得る．以前と同様にこの式は適切に規格化されているが，その理由は $\langle 0, t_1|$ は粒子の無い状態，すなわち真空であり，さらに真空であり続けるからである．

この表現の持つ物理的な結果を引き出すためには，$\langle \boldsymbol{r}, t_1 | \boldsymbol{r}', t_2 \rangle$ を離散的な形で表示すると便利である．そのために，積分 $\int (\mathrm{d}\boldsymbol{p})$ を小さな $(\mathrm{d}\boldsymbol{p})$ セル（ここで同じ記号を用いる）の和に分割すると

$$\begin{aligned}\langle \boldsymbol{r}, t_1 | \boldsymbol{r}', t_2 \rangle &= \sum_{\boldsymbol{p}} \frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{p})}{(2\pi\hbar)^3}\, \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_{\boldsymbol{p}}(t_1-t_2)} \\ &= \sum_{\boldsymbol{p}} \phi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})\, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_{\boldsymbol{p}}(t_1-t_2)} \phi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}')^* \end{aligned} \tag{10.8.11}$$

と表される．ここで

$$\phi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}) = \sqrt{\frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{p})}{(2\pi\hbar)^3}}\, \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{10.8.12}$$

とした．次に

$$\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\, \psi(\boldsymbol{r})^{\dagger\prime} \phi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}) = \psi_{\boldsymbol{p}}^{\dagger\prime}, \qquad \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\, \phi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}')^* \psi(\boldsymbol{r}')'' = \psi_{\boldsymbol{p}}'' \tag{10.8.13}$$

と定義すると，$T = t_1 - t_2$ として

$$\begin{aligned}\langle \psi^{\dagger\prime}, t_1 | \psi'', t_2 \rangle &= \mathrm{e}^{\sum_{\boldsymbol{p}} \psi_{\boldsymbol{p}}^{\dagger\prime}\, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_{\boldsymbol{p}}T} \psi_{\boldsymbol{p}}''} \\ &= \prod_{\boldsymbol{p}} \mathrm{e}^{\psi_{\boldsymbol{p}}^{\dagger\prime}\, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_{\boldsymbol{p}}T} \psi_{\boldsymbol{p}}''} \\ &= \prod_{\boldsymbol{p}} \sum_{n_{\boldsymbol{p}}=0}^{\infty} \frac{1}{n_{\boldsymbol{p}}!} \underbrace{\left(\psi_{\boldsymbol{p}}^{\dagger\prime}\, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_{\boldsymbol{p}}T} \psi_{\boldsymbol{p}}''\right)^{n_{\boldsymbol{p}}}}_{=\left(\psi_{\boldsymbol{p}}^{\dagger\prime}\right)^{n_{\boldsymbol{p}}} \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}n_{\boldsymbol{p}}E_{\boldsymbol{p}}T} \left(\psi_{\boldsymbol{p}}''\right)^{n_{\boldsymbol{p}}}} \end{aligned} \tag{10.8.14}$$

を得る．特に BE 統計を考えると

$$\begin{aligned}\langle \psi^{\dagger\prime}, t_1 | \psi'', t_2 \rangle &= \prod_{\boldsymbol{p}} \sum_{n_{\boldsymbol{p}}=0}^{\infty} \frac{\left(\psi_{\boldsymbol{p}}^{\dagger\prime}\right)^{n_{\boldsymbol{p}}}}{\sqrt{n_{\boldsymbol{p}}!}}\, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}n_{\boldsymbol{p}}E_{\boldsymbol{p}}T} \frac{\left(\psi_{\boldsymbol{p}}''\right)^{n_{\boldsymbol{p}}}}{\sqrt{n_{\boldsymbol{p}}!}} \\ &= \sum_{\{n\}} \langle \psi^{\dagger\prime} | \{n\} \rangle\, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E(\{n\})T} \langle \{n\} | \psi'' \rangle \end{aligned} \tag{10.8.15}$$

となる．ここで

$$E(\{n\}) = \sum_{\boldsymbol{p}} n_{\boldsymbol{p}} E_{\boldsymbol{p}}, \qquad n_{\boldsymbol{p}} = 0, 1, 2, \ldots \tag{10.8.16}$$

は $\{n\}$ で特定された多粒子状態のエネルギーであり，波動関数は

$$\left\langle \psi^{\dagger\prime} \middle| \{n\} \right\rangle = \prod_{\boldsymbol{p}} \frac{\left(\psi_{\boldsymbol{p}}^{\dagger\prime}\right)^{n_{\boldsymbol{p}}}}{\sqrt{n_{\boldsymbol{p}}!}}, \qquad \left\langle \{n\} \middle| \psi'' \right\rangle = \prod_{\boldsymbol{p}} \frac{\left(\psi_{\boldsymbol{p}}{}''\right)^{n_{\boldsymbol{p}}}}{\sqrt{n_{\boldsymbol{p}}!}} \tag{10.8.17}$$

である．これらは明らかにエネルギー固有値であり，よく知られている振動子の波動関数であって，今回は(無限に)多くの自由度に対応している．

FD 統計ではどのような結果になるだろうか？ この時点までは特に統計性を指定せずに，いずれの場合にも ψ および $\psi^\dagger$ の固有ベクトルと固有値を扱うことができることを当然であるとしてきた．しかし，たとえば固有値方程式

$$\psi_{\boldsymbol{p}} \left| \psi' \right\rangle = \left| \psi' \right\rangle \psi'_{\boldsymbol{p}} \tag{10.8.18}$$

は，FD 統計ではどのような意味があるだろうか？ 演算子を 2 回作用すると

$$\psi_{\boldsymbol{p}} \psi_{\boldsymbol{p}'} \left| \psi' \right\rangle = \psi_{\boldsymbol{p}} \left| \psi' \right\rangle \psi'_{\boldsymbol{p}'} = \left| \psi' \right\rangle \psi'_{\boldsymbol{p}} \psi'_{\boldsymbol{p}'} \tag{10.8.19}$$

となり，したがって ψ の代数的な性質を固有値 ψ' も満たさなければならないから，

$$\{\psi'_{\boldsymbol{p}}, \psi'_{\boldsymbol{p}'}\} = 0 \tag{10.8.20}$$

が成り立つ．

BE 統計におけるすべての量と交換する数に対比して，$\psi'_{\boldsymbol{p}}$ および $\psi_{\boldsymbol{p}}^{\dagger\prime}$ は互いに反交換する数の集合である(完全に反交換する量は 1840 年頃グラスマン*により導入された)．FD 統計の性質 $n_{\boldsymbol{p}} = 0, 1$ は，性質

$$(\psi''_{\boldsymbol{p}})^2 = 0 \quad \text{および} \quad (\psi_{\boldsymbol{p}}^{\dagger\prime})^2 = 0 \tag{10.8.21}$$

を含むこの完全反対称性により保証される．

ここで式(10.8.14)に戻り，FD 統計では指数関数を展開すると線形項で終わることに注意すると

$$\begin{aligned} \left\langle \psi^{\dagger\prime}, t_1 \middle| \psi'', t_2 \right\rangle &= \prod_{\boldsymbol{p}} \mathrm{e}^{\psi_{\boldsymbol{p}}^{\dagger\prime} \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} E_{\boldsymbol{p}} T} \psi''_{\boldsymbol{p}}} \\ &= \prod_{\boldsymbol{p}} \left[1 + \psi_{\boldsymbol{p}}^{\dagger\prime} \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} E_{\boldsymbol{p}} T} \psi''_{\boldsymbol{p}} \right] \\ &= \sum_{\{n\}} \left\langle \psi^{\dagger\prime} \middle| \{n\} \right\rangle \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar} E(\{n\}) T} \left\langle \{n\} \middle| \psi'' \right\rangle \end{aligned} \tag{10.8.22}$$

となり，さらに

$$\left\langle \psi^{\dagger\prime} \middle| \{n\} \right\rangle \left\langle \{n\} \middle| \psi'' \right\rangle = \prod_{(n_{\boldsymbol{p}}=1)} \left(\psi_{\boldsymbol{p}}^{\dagger\prime} \psi''_{\boldsymbol{p}} \right) \tag{10.8.23}$$

---

*Hermann Günther GRASSMANN (1809–1877)

であることがわかる．1 つの例として，モード 1,3,7 では $n_{\boldsymbol{p}}=1$ とし他のモードでは $n_{\boldsymbol{p}}=0$ とすると，

$$\begin{aligned}\prod_{(n_{\boldsymbol{p}}=1)}\left(\psi_{\boldsymbol{p}}^{\dagger\prime}\psi_{\boldsymbol{p}}^{\prime\prime}\right) &= \psi_1^{\dagger\prime}\psi_1^{\prime\prime}\,\psi_3^{\dagger\prime}\psi_3^{\prime\prime}\,\psi_7^{\dagger\prime}\psi_7^{\prime\prime} \\ &= (-1)^2\psi_3^{\dagger\prime}\,\psi_1^{\dagger\prime}\psi_1^{\prime\prime}\,\psi_3^{\prime\prime}\,\psi_7^{\dagger\prime}\psi_7^{\prime\prime} \\ &= (-1)^{2+4}\psi_7^{\dagger\prime}\,\psi_3^{\dagger\prime}\,\psi_1^{\dagger\prime}\psi_1^{\prime\prime}\,\psi_3^{\prime\prime}\,\psi_7^{\prime\prime} \\ &= \left(\psi_7^{\dagger\prime}\psi_3^{\dagger\prime}\psi_1^{\dagger\prime}\right)\left(\psi_1^{\prime\prime}\psi_3^{\prime\prime}\psi_7^{\prime\prime}\right) \end{aligned} \tag{10.8.24}$$

と偶数個の符号変化が現れる．さらに一般的に，標準的な積の順序 $\prod$ およびその逆順 $\prod^{\mathrm{T}}$ を採用すると

$$\left\langle\psi^{\dagger\prime}\middle|\{n\}\right\rangle=\prod_{\boldsymbol{p}}^{\mathrm{T}}\left(\psi_{\boldsymbol{p}}^{\dagger\prime}\right)^{n_{\boldsymbol{p}}}\,,\qquad \left\langle\{n\}\middle|\psi^{\prime\prime}\right\rangle=\prod_{\boldsymbol{p}}\left(\psi_{\boldsymbol{p}}^{\prime\prime}\right)^{n_{\boldsymbol{p}}} \tag{10.8.25}$$

となる．両方の統計の場合を統一的に表すために $1/\sqrt{n_{\boldsymbol{p}}!}$ の因子を含めることができるが，FD 統計ではこの因子は 1 である．

これらの結果と，ψ および $\psi^{\dagger}$ を生成および消滅演算子と解釈することとが矛盾しないことを確かめることができる．真空状態では

$$\left\langle\psi^{\dagger\prime}\middle|0\right\rangle=1\,,\qquad \left\langle0\middle|\psi^{\prime\prime}\right\rangle=1 \tag{10.8.26}$$

が成り立つことに注意すると，両方の統計に対して

$$\left\langle\psi^{\dagger\prime}\middle|\{n\}\right\rangle=\prod_{\boldsymbol{p}}^{\mathrm{T}}\frac{\left(\psi_{\boldsymbol{p}}^{\dagger\prime}\right)^{n_{\boldsymbol{p}}}}{\sqrt{n_{\boldsymbol{p}}!}}\left\langle\psi^{\dagger\prime}\middle|0\right\rangle=\left\langle\psi^{\dagger\prime}\middle|\prod_{\boldsymbol{p}}^{\mathrm{T}}\frac{\left(\psi_{\boldsymbol{p}}^{\dagger}\right)^{n_{\boldsymbol{p}}}}{\sqrt{n_{\boldsymbol{p}}!}}\middle|0\right\rangle \tag{10.8.27}$$

が成り立ち，したがって

$$\left|\{n}\right\rangle=\prod_{\boldsymbol{p}}^{\mathrm{T}}\frac{\left(\psi_{\boldsymbol{p}}^{\dagger}\right)^{n_{\boldsymbol{p}}}}{\sqrt{n_{\boldsymbol{p}}!}}\left|0\right\rangle \tag{10.8.28}$$

となり，これは $\psi^{\dagger}$ が生成演算子という意味から要請される通りである．同様に

$$\left\langle\{n\}\middle|\psi^{\prime\prime}\right\rangle=\left\langle0\middle|\psi^{\prime\prime}\right\rangle\prod_{\boldsymbol{p}}\frac{\left(\psi_{\boldsymbol{p}}^{\prime\prime}\right)^{n_{\boldsymbol{p}}}}{\sqrt{n_{\boldsymbol{p}}!}}=\left\langle0\middle|\prod_{\boldsymbol{p}}\frac{\left(\psi_{\boldsymbol{p}}\right)^{n_{\boldsymbol{p}}}}{\sqrt{n_{\boldsymbol{p}}!}}\middle|\psi^{\prime\prime}\right\rangle \tag{10.8.29}$$

および

$$\left\langle\{n\}\right|=\left\langle0\right|\prod_{\boldsymbol{p}}\frac{\left(\psi_{\boldsymbol{p}}\right)^{n_{\boldsymbol{p}}}}{\sqrt{n_{\boldsymbol{p}}!}} \tag{10.8.30}$$

であり，† は積の順序を逆にするから，確かに左ベクトルは右ベクトルのエルミート共役である．

波動関数 $\phi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r})$ は $h=\boldsymbol{p}^2/(2M)$ の固有関数であり

$$\frac{1}{2M}\left(\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\boldsymbol{\nabla}\right)^2\phi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}) = E_{\boldsymbol{p}}\phi_{\boldsymbol{p}}(\boldsymbol{r}) \tag{10.8.31}$$

を満たす．同じようにして，任意の1体のエネルギー $h(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})$，たとえば $h = \boldsymbol{p}^2/(2M) + V(\boldsymbol{r})$ に対しては，固有関数 $\langle\boldsymbol{r}|\underbrace{E,\ldots}_{a}\rangle = \phi_a(\boldsymbol{r})$ を

$$h\Big(\boldsymbol{r},\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\boldsymbol{\nabla}\Big)\phi_a(\boldsymbol{r}) = E_a\phi_a(\boldsymbol{r}) \tag{10.8.32}$$

によって導入すると，時間変換関数は

$$\begin{aligned}\langle\boldsymbol{r}|\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}ht_1}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}ht_2}|\boldsymbol{r}'\rangle &= \langle\boldsymbol{r},t_1|\boldsymbol{r}',t_2\rangle\\ &= \sum_a \underbrace{\phi_a(\boldsymbol{r})}_{=\langle\boldsymbol{r}|a\rangle}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E_a(t_1-t_2)}\,\underbrace{\phi_a(\boldsymbol{r}')^*}_{=\langle a|\boldsymbol{r}'\rangle}\end{aligned} \tag{10.8.33}$$

となり，今までと同様にすべてを導出できる．特に FD 統計において，多粒子状態は

$$|\{n\}\rangle = \prod_{(n_a=1)}^{\mathrm{T}}\psi_a^\dagger|0\rangle \tag{10.8.34}$$

と表される．ここで演算子

$$\psi_a^\dagger = \int(\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\,\psi(\boldsymbol{r}')^\dagger\phi_a(\boldsymbol{r}') \tag{10.8.35}$$

を導入した．さらに真空は

$$\psi_a|0\rangle = \int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,\phi_a(\boldsymbol{r}')^*\,\underbrace{\psi(\boldsymbol{r})|0\rangle}_{=0} = 0 \tag{10.8.36}$$

を満たす．例として，1粒子状態は

$$|1_a\rangle = \int(\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\,\psi(\boldsymbol{r}')^\dagger\phi_a(\boldsymbol{r}')|0\rangle \tag{10.8.37}$$

であり，2粒子状態は

$$|1_a,1_b\rangle = \int(\mathrm{d}r'')\,\psi(\boldsymbol{r}'')^\dagger\phi_b(\boldsymbol{r}'')\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\,\psi(\boldsymbol{r}')^\dagger\phi_a(\boldsymbol{r}')|0\rangle \tag{10.8.38}$$

と表される．

これらの状態に対する $\psi(\boldsymbol{r})$ の効果は何だろうか？ 最初に1粒子状態に対しては

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{r})|1_a\rangle &= \int(\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\,\underbrace{\psi(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}')^\dagger}_{=\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')-\psi(\boldsymbol{r}')^\dagger\psi(\boldsymbol{r})\,\to\,\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\phi_a(\boldsymbol{r}')|0\rangle\\ &= \phi_a(\boldsymbol{r})|0\rangle\end{aligned} \tag{10.8.39}$$

となり，きわめて理にかなっている．すなわち波動関数 $\phi_a(\boldsymbol{r})$ は 1 粒子状態での $\psi(\boldsymbol{r})$ を表現している．次に，2 粒子状態に対しては

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{r})\big|1_a,1_b\big\rangle &= \int(\mathrm{d}r'')\underbrace{\psi(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}'')^\dagger}_{=\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'')-\psi(\boldsymbol{r}'')^\dagger\psi(\boldsymbol{r})}\phi_b(\boldsymbol{r}'') \\ &\qquad\times\underbrace{\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}')^\dagger\phi_a(\boldsymbol{r}')\big|0\big\rangle}_{=|1_a\rangle} \\ &= \big|1_a\big\rangle\phi_b(\boldsymbol{r}) - \underbrace{\int(\mathrm{d}r'')\psi(\boldsymbol{r}'')^\dagger\phi_b(\boldsymbol{r}'')}_{=\psi_b^\dagger}\underbrace{\psi(\boldsymbol{r})\big|1_a\big\rangle}_{=|0\rangle\phi_a(\boldsymbol{r})} \\ &= \big|1_a\big\rangle\phi_b(\boldsymbol{r}) - \big|1_b\big\rangle\phi_a(\boldsymbol{r}) \end{aligned} \tag{10.8.40}$$

となり，両辺のラベル a, b についての**反対称性**を保ったまま 1 つの粒子を消滅するには，2 つの方法があることをこの結果は示している．この手続きが一般的であることを，$\psi(\boldsymbol{r})\big|1_a,1_b,1_c\big\rangle$ を用いて例証しよう．このベクトルは状態ラベルの任意の対について反対称であり，巡回的な置換（偶置換）に対しては不変であるから，

$$\psi(\boldsymbol{r})\big|1_a,1_b,1_c\big\rangle = \big|1_a,1_b\big\rangle\phi_c(\boldsymbol{r}) + \big|1_c,1_a\big\rangle\phi_b(\boldsymbol{r}) + \big|1_b,1_c\big\rangle\phi_a(\boldsymbol{r}) \tag{10.8.41}$$

が成り立つ．

元に戻って，2 つの粒子の消滅を試みると

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}')\big|1_a,1_b\big\rangle &= \psi(\boldsymbol{r})\left[\big|1_a\big\rangle\phi_b(\boldsymbol{r}') - \big|1_b\big\rangle\phi_a(\boldsymbol{r}')\right] \\ &= \big|0\big\rangle\big(\phi_a(\boldsymbol{r})\phi_b(\boldsymbol{r}') - \phi_b(\boldsymbol{r})\phi_a(\boldsymbol{r}')\big)\end{aligned} \tag{10.8.42}$$

となり，a, b および $\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'$ に関して適切な反対称化がなされているから，2 粒子波動関数であることがわかる．3 つの粒子でも同様にして，循環的な対称性を用いると次の式を得る．

$$\begin{aligned}\psi(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}')\big|1_a,1_b,1_c\big\rangle &= \big|1_a\big\rangle\big(\phi_b(\boldsymbol{r})\phi_c(\boldsymbol{r}') - \phi_c(\boldsymbol{r})\phi_b(\boldsymbol{r}')\big) \\ &\quad + \big|1_b\big\rangle\big(\phi_c(\boldsymbol{r})\phi_a(\boldsymbol{r}') - \phi_a(\boldsymbol{r})\phi_c(\boldsymbol{r}')\big) \\ &\quad + \big|1_c\big\rangle\big(\phi_a(\boldsymbol{r})\phi_b(\boldsymbol{r}') - \phi_b(\boldsymbol{r})\phi_a(\boldsymbol{r}')\big).\end{aligned} \tag{10.8.43}$$

さらに，4, 5, ... 粒子の状態が求まる．

問題

10-1a　BE 統計：次の式を計算せよ．

$$\big(\psi(a')\big)^2\big|\{n\}\big\rangle\,,\qquad \big(\psi(a')^\dagger\big)^2\big|\{n\}\big\rangle\,.$$

さらに $a' \neq a''$ の場合に次の式を計算せよ．

$$\psi(a')\psi(a'')\big|\{n\}\big\rangle\,,\quad \psi(a')^\dagger\psi(a'')^\dagger\big|\{n\}\big\rangle\,,\quad \psi(a')^\dagger\psi(a'')\big|\{n\}\big\rangle\,.$$

10-1b FD 統計：同じ質問に答えよ（もちろん，$a' \neq a''$ の場合のみ）．

10-2 FD 統計：$a' \neq a''$ に対して，2 つの演算子

$$'\psi(a') = (-1)^{N_{>a'}}\psi(a') \quad と \quad '\psi(a'') = (-1)^{N_{>a''}}\psi(a'')$$

は交換することを示せ．ここで，たとえば演算子 $N_{>a'}$ はある標準の順序で並んだ a' の後のすべてのモードを占める粒子の数を数える．10.2 節で与えられた表現と，どのように関連しているか？

10-3 式(10.3.8)および(10.3.9)を証明せよ．

10-4a 回転磁場中のスピン s について：時間 T の間に遷移 $m=-s \to m=s$ が起こる確率はいくらか？ 遷移 $m=s \to m=-s$ についてはどうなるか？

10-4b 整数 s に対して前問と同じ設定とする．遷移 $m=-s \to m=0$，$m=s \to m=0$，$m=0 \to m=\pm s$ の確率はそれぞれ何か？

10-4c 再び $s=1$ に対して同じ設定：問題 10-4a と 10-4b から利用できる情報を用いて，時間 T の間に遷移 $m=0 \to m=0$ が起こる確率を求めよ．

10-5 10.5 節のスピン動力学に関する問題：磁場がゆっくりと $\boldsymbol{B}(t<0)=B_0\boldsymbol{e}_z$ から $\boldsymbol{B}(t>T)=-B_0\boldsymbol{e}_z$ へ変化するとする．与えられたスピン s の初期状態は $m=s$ である．磁場が

$$\boldsymbol{B}(t) = B_0\frac{T-2t}{T}\boldsymbol{e}_z$$

の場合に終状態を求めよ．また

$$\boldsymbol{B}(t) = B_0\big(\boldsymbol{e}_z\cos(\pi t/T) + \boldsymbol{e}_x\sin(\pi t/T)\big)$$

の場合についても考えよ．

10-6 いずれの統計に関しても

$$G_\psi = \mathrm{i}\hbar\sum_{a'}\psi(a',t)^\dagger\,\delta\psi(a',t)\,,$$

$$G_{\psi^\dagger} = \mathrm{i}\hbar\sum_{a'}\delta\psi(a',t)^\dagger\,\psi(a',t)$$

である．$G_{\psi^\dagger}$ が期待されたものであることを，すでに知られた FD 交換関係を用いて確かめよ．

10-7　演算子 F は ψ と $\psi^\dagger$ について次数 n であるとする．FD 系で

$$\delta_\psi F = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[F, G_\psi\right]$$

が成り立つことは，

$$n\ \text{偶数:}\quad \left[F, \psi(a', t)^\dagger\right] = \frac{\partial_{\mathrm{r}} F}{\partial\psi(a', t)} = -\frac{\partial_{\mathrm{l}} F}{\partial\psi(a', t)},$$

$$n\ \text{奇数:}\quad \left\{F, \psi(a', t)^\dagger\right\} = \frac{\partial_{\mathrm{r}} F}{\partial\psi(a', t)} = \frac{\partial_{\mathrm{l}} F}{\partial\psi(a', t)}$$

を意味することを証明せよ．

10-8　ハミルトニアンを

$$H = \sum_{a', a''} \psi(a', t)^\dagger \langle a'|h|a''\rangle \psi(a'', t) + \frac{1}{2}\sum_{a', \ldots, a'^{\mathrm{v}}} \psi(a', t)^\dagger \psi(a''', t)^\dagger \langle a', a'''|v|a'', a'^{\mathrm{v}}\rangle \psi(a'^{\mathrm{v}}, t)\psi(a'', t)$$

とする．BE 系の運動方程式は何か？ また，FD 系の運動方程式は何か？

10-9　相互作用しない粒子に対して，式(10.8.2)と同時刻交換関係(10.7.6)を用いて，異なる時刻の交換関係を求めよ．

第11章

多電子原子

11.1 ハートレー・フォック法

ここでは 10 章で学んだ方法を Z 個の電子がある中性の原子に適用しよう．まず基本的な物理的近似として，原子核と電子および電子間の静電ポテンシャルのみを考慮し，原子核は無限に重い点電荷(Ze)として扱う．

するとハミルトニアンは

$$
\begin{aligned}
H &= H^{(1)} + H^{(2)} \\
&= \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\, \psi(\boldsymbol{r})^\dagger \left(-\frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{el}}}\boldsymbol{\nabla}^2 - \frac{Ze^2}{r}\right)\psi(\boldsymbol{r}) \\
&\quad + \frac{1}{2}\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})(\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\, \psi(\boldsymbol{r})^\dagger \psi(\boldsymbol{r}')^\dagger \frac{e^2}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\psi(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r})
\end{aligned}
\tag{11.1.1}
$$

と書ける．ここで 1 体の項 $H^{(1)}$ は電子の運動エネルギーおよび原子核と電子のクーロン相互作用を表し，2 体の項 $H^{(2)}$ は静電的電子間相互作用である．これらの項は式(10.7.9)と式(10.7.12)の一般的な演算子に対して，それぞれ以下の具体的な形を適用した演算子である．

$$
h\left(\boldsymbol{r}, \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\boldsymbol{\nabla}\right) = -\frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{el}}}\boldsymbol{\nabla}^2 - \frac{Ze^2}{r} \quad \text{および} \quad v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = \frac{e^2}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\,. \tag{11.1.2}
$$

可能なすべての多電子状態は全電子数の演算子の固有値が Z である固有ベクトルで記述される．

$$
\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\, \psi(\boldsymbol{r})^\dagger \psi(\boldsymbol{r})|\ \rangle = |\ \rangle Z\,. \tag{11.1.3}
$$

ここで関心があるのは，電子は FD 粒子(フェルミオン)であるので，すべての電子は異なる状態を占有しなければならないという仮定のもとで，近似的に取り扱われる基底状態である．このような近似的な基底状態は

$$|\mathrm{g}\rangle = \prod_a^{\mathrm{T}} \psi_a^\dagger |0\rangle \tag{11.1.4}$$

と書ける．ただし a は Z 個の異なる状態を指定する量子数である．一般的に，どのような状態での H の期待値も，真の基底状態のエネルギー E_g よりは大きい．

$$\langle\ |H|\ \rangle = \sum_{E',\ldots} E' \big|\langle E',\ldots|\ \rangle\big|^2 \geq \sum_{E',\ldots} E_\mathrm{g} \big|\langle E',\ldots|\ \rangle\big|^2 = E_\mathrm{g}\,. \tag{11.1.5}$$

したがって最もよく近似された状態は，$\langle H\rangle$ を最小にする状態である．もちろんここでは 6.11 節のレイリー・リッツの変分法を適用していこう．

そこで，まず

$$\langle\mathrm{g}|\psi(\boldsymbol{r})^\dagger = \sum_a (\pm)_a \phi_a(\boldsymbol{r})^* \langle \mathrm{g} - 1_a|\,,$$
$$\psi(\boldsymbol{r}')|\mathrm{g}\rangle = \sum_a |\mathrm{g} - 1_a\rangle (\pm)_a \phi_a(\boldsymbol{r}') \tag{11.1.6}$$

に注目しよう．ただし複号は $\prod^{\mathrm{T}}$ における，状態の積の順番の定義に暗に依存する符号である．上の式の内積は

$$\langle\mathrm{g}|\psi(\boldsymbol{r})^\dagger \psi(\boldsymbol{r}')|\mathrm{g}\rangle = \sum_a \phi_a(\boldsymbol{r})^* \phi_a(\boldsymbol{r}') \tag{11.1.7}$$

となり，これより 1 体の項の期待値は次のように書ける．

$$\langle\mathrm{g}|H^{(1)}|\mathrm{g}\rangle = \sum_a \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\, \phi_a(\boldsymbol{r})^* \left(-\frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{el}}} \boldsymbol{\nabla}^2 - \frac{Ze^2}{r} \right) \phi_a(\boldsymbol{r})\,. \tag{11.1.8}$$

同様にして

$$\psi(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r})|\mathrm{g}\rangle = \sum_{a<b} |\mathrm{g} - 1_a - 1_b\rangle (\pm)_{ab} \big[\phi_b(\boldsymbol{r}')\phi_a(\boldsymbol{r}) - \phi_a(\boldsymbol{r}')\phi_b(\boldsymbol{r})\big] \tag{11.1.9}$$

となるから

$$\begin{aligned}\langle\mathrm{g}|\psi(\boldsymbol{r})^\dagger \psi(\boldsymbol{r}')^\dagger \psi(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r})|\mathrm{g}\rangle &= \sum_{a<b} \big[\phi_a(\boldsymbol{r})\phi_b(\boldsymbol{r}') - \phi_b(\boldsymbol{r})\phi_a(\boldsymbol{r}')\big]^* \\ &\quad \times \big[\phi_a(\boldsymbol{r})\phi_b(\boldsymbol{r}') - \phi_b(\boldsymbol{r})\phi_a(\boldsymbol{r}')\big]\end{aligned} \tag{11.1.10}$$

を得る．または $\sum_{a<b} \to \frac{1}{2}\sum_{a\neq b}$ として

$$\begin{aligned}&\langle\mathrm{g}|\psi(\boldsymbol{r})^\dagger \psi(\boldsymbol{r}')^\dagger \psi(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r})|\mathrm{g}\rangle \\ &\qquad = \sum_{a\neq b} \big[\phi_a(\boldsymbol{r})\phi_b(\boldsymbol{r}')\big]^* \big[\phi_a(\boldsymbol{r})\phi_b(\boldsymbol{r}') - \phi_b(\boldsymbol{r})\phi_a(\boldsymbol{r}')\big]\end{aligned} \tag{11.1.11}$$

と書くと，2 体の項は以下のようになる．

$$\langle \mathrm{g}|H^{(2)}|\mathrm{g}\rangle = \frac{1}{2}\sum_{a\neq b}\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})(\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\,\phi_a(\boldsymbol{r})^*\phi_b(\boldsymbol{r}')^* \times \frac{e^2}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\left[\phi_a(\boldsymbol{r})\phi_b(\boldsymbol{r}') - \phi_b(\boldsymbol{r})\phi_a(\boldsymbol{r}')\right] . \tag{11.1.12}$$

ここで $a=b$ ならば $\phi_a(\boldsymbol{r})\phi_b(\boldsymbol{r}') - \phi_b(\boldsymbol{r})\phi_a(\boldsymbol{r}') = 0$ だから，和を $\sum_{a\neq b} \to \sum_{a,b}$ としても $\langle \mathrm{g}|H^{(2)}|\mathrm{g}\rangle$ の値は変わらない．これよりエネルギーの推定値(これが真の基底状態のエネルギーの上限を与えることを忘れないこと)は以下のように書ける．

$$E = \sum_a \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,\phi_a^*\,h\,\phi_a + \frac{1}{2}\sum_{a,b}\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})(\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\,\big[\phi_a(\boldsymbol{r})^*\phi_b(\boldsymbol{r}')^*v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\phi_b(\boldsymbol{r}')\phi_a(\boldsymbol{r}) - \phi_a(\boldsymbol{r})^*\phi_b(\boldsymbol{r}')^*v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\phi_a(\boldsymbol{r}')\phi_b(\boldsymbol{r})\big] . \tag{11.1.13}$$

ここで h と v は式(11.1.2)で与えられており，また 1 体の電子の波動関数はもちろん次のように正規直交系を成している．

$$\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,\phi_a(\boldsymbol{r})^*\phi_b(\boldsymbol{r}) = \delta_{ab} . \tag{11.1.14}$$

さてここで波動関数 ϕ_a^* と ϕ_a で変分してエネルギー E の最小値を探していこう．

$$\delta E = \sum_a \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,\delta\phi_a(\boldsymbol{r})^*\Big(h\phi_a(\boldsymbol{r}) + \sum_b \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\big[\phi_b(\boldsymbol{r}')^*v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\phi_b(\boldsymbol{r}')\phi_a(\boldsymbol{r}) - \phi_b(\boldsymbol{r}')^*v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\phi_a(\boldsymbol{r}')\phi_b(\boldsymbol{r})\big]\Big) + \{\text{複素共役}\} . \tag{11.1.15}$$

式(11.1.14)の制約条件より

$$\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,\big[\delta\phi_a^*\,\phi_b + \phi_a^*\,\delta\phi_b\big] = 0 \tag{11.1.16}$$

となり，この条件のもとで変分すると次の式が結論として得られる．

$$\left[h + \sum_b \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\phi_b(\boldsymbol{r}')^*v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\phi_b(\boldsymbol{r}')\right]\phi_a(\boldsymbol{r}) \underbrace{- \sum_b \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\,\phi_b(\boldsymbol{r}')^*v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\phi_a(\boldsymbol{r}')\,\phi_b(\boldsymbol{r})}_{\text{交換項}} = \sum_b \mathcal{E}_{a,b}\phi_b(\boldsymbol{r}) . \tag{11.1.17}$$

ここでエネルギーのパラメーター $\mathcal{E}_{a,b}$ は自己矛盾なく決定されるべき量である．これがハートレー*・フォックの方程式である．

*Douglas Rayner HARTREE (1897–1958)

近似として，いわゆる交換項を落とすとずっと簡単化される．交換項は $\phi_b(\boldsymbol{r}')^*\phi_a(\boldsymbol{r}')$ を含んでいるため a と b の波動関数の重なりが必要で，そのために交換項からの寄与は特に $Z \gg 1$ では制限されるということに注意しよう．さて，交換項を落とした場合は ϕ_a は次の1体の有効ポテンシャル $V(\boldsymbol{r})$ の固有関数として選ぶことができる．

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m_{\rm el}}\boldsymbol{\nabla}^2 + V\right)\phi_a = \mathcal{E}_a\phi_a\ . \tag{11.1.18}$$

ここで

$$V(\boldsymbol{r}) = -\frac{Ze^2}{r} + \sum_b \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\,\frac{e^2|\phi_b(\boldsymbol{r}')|^2}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} \tag{11.1.19}$$

であり，これはハートレー方程式と呼ばれる．

明らかにここでは電子の平均密度が現れており

$$n(\boldsymbol{r}) = \sum_b |\phi_b(\boldsymbol{r})|^2\ , \qquad \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\, n(\boldsymbol{r}) = \sum_b 1 = Z\ . \tag{11.1.20}$$

それを積分した2番目の式は，式(11.1.3)をここでの記法で表現したものである．これより全エネルギーは

$$\begin{aligned} E = \sum_a \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\phi_a^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m_{\rm el}}\boldsymbol{\nabla}^2 - \frac{Ze^2}{r}\right)\phi_a \\ + \frac{e^2}{2}\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})(\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\frac{n(\boldsymbol{r})n(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} \end{aligned} \tag{11.1.21}$$

となり，これは有効ポテンシャルを使って以下のように書くこともできる．

$$E = \underbrace{\sum_a \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\phi_a^*\left(-\frac{\hbar^2}{2m_{\rm el}}\boldsymbol{\nabla}^2 + V\right)\phi_a}_{=\sum_a \mathcal{E}_a} - \frac{1}{2}\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})(\mathrm{d}\boldsymbol{r}')e^2\frac{n(\boldsymbol{r})n(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\ . \tag{11.1.22}$$

最初の項は各独立粒子のエネルギー $\mathcal{E}_a$ の和で，電子間の相互作用のエネルギーを二重に考慮しており，第2項目は負の値で，二重に数えられた相互作用のエネルギーを補正する項である．

ここでは最適な1体の波動関数 ϕ_a を探してきた．もう1つの手順は，波動関数 ϕ_a はある共通の有効ポテンシャル V の固有関数であるとして，最適の有効ポテンシャルを探す方法である．これは交換項を含めても可能であるが，ここでは除いて議論しよう．そこで式(11.1.21)のエネルギーの式から出発し，ϕ_a は式(11.1.18)を満たすように選ぶとしよう．するとエネルギーは次のように書ける．

$$E = \sum_a \mathcal{E}_a - \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\left(V + \frac{Ze^2}{r}\right)n(\boldsymbol{r}) + \frac{e^2}{2}\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})(\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\frac{n(\boldsymbol{r})n(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\ . \tag{11.1.23}$$

V を変化させることで，1体のエネルギー固有値の変化は

$$\delta\mathcal{E}_a = \langle\delta V\rangle = \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,\delta V\,|\phi_a|^2 \tag{11.1.24}$$

となることを思い出すと，第1項目の変化は次のように書ける．

$$\delta\sum_a \mathcal{E}_a = \int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,\delta V\,\sum_a |\phi_a|^2 = \int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,\delta V\,n\,. \tag{11.1.25}$$

これより全エネルギーの変化は

$$\begin{aligned}\delta E = \int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,\delta V\,n - \int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\left[\delta V\,n + \left(V + \frac{Ze^2}{r}\right)\delta n\right]\\ + \int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,\delta n\,e^2\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\frac{n(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\end{aligned} \tag{11.1.26}$$

または

$$\delta E = \int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,\delta n\left[-V - \frac{Ze^2}{r} + e^2\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\,\frac{n(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\right] \tag{11.1.27}$$

と書ける．つまり全エネルギー E は実際に電子密度 n の汎関数であることがわかる．ここで以下の電子数の変化の制約条件

$$\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,\delta n = 0 \tag{11.1.28}$$

より $\delta E = 0$ ということは，式(11.1.27)の $[\cdots]$ の部分が定数であることを意味する．ここで $V(\boldsymbol{r}) \to V(\boldsymbol{r}) + V_0$ としても，$\mathcal{E}_a \to \mathcal{E}_a + V_0$ となることから式(11.1.23)の全エネルギーは変化しないから，最も自然な選択である $r \to \infty$ で $V(\boldsymbol{r}) \to 0$ となるようにすれば定数項はゼロとなる．したがって最適な V は

$$V(\boldsymbol{r}) = -\frac{Ze^2}{r} + e^2\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\frac{n(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} \tag{11.1.29}$$

となり，これは式(11.1.19)で与えられている関係式である．結果として式(11.1.18)，(11.1.20)および(11.1.29)の組をまとめて解かなければならない．そしてその目的のためには反復法が思い起こされる．

議論を続けていく前に，ここで次のポアソン方程式の意味することについて注意しよう．

$$-\boldsymbol{\nabla}^2\left(V + \frac{Ze^2}{r}\right) = 4\pi e^2 n\,. \tag{11.1.30}$$

これを使うと次の関係式が得られる．

$$\begin{aligned}-\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\left(V + \frac{Ze^2}{r}\right)n + \frac{1}{2}\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,n(\boldsymbol{r})\underbrace{\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\,e^2\frac{n(\boldsymbol{r}')}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}_{=V+Ze^2/r}\\ = -\frac{1}{2}\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\left(V + \frac{Ze^2}{r}\right)\frac{1}{4\pi e^2}\left(-\boldsymbol{\nabla}^2\right)\left(V + \frac{Ze^2}{r}\right)\\ = -\frac{1}{8\pi e^2}\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\left[\boldsymbol{\nabla}\left(V + \frac{Ze^2}{r}\right)\right]^2\,.\end{aligned} \tag{11.1.31}$$

これはちょうど電子の負の静電エネルギーである．

実際全エネルギーは

$$E = \sum_a \mathcal{E}_a - \frac{1}{8\pi e^2}\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}) \left[\boldsymbol{\nabla}\left(V + \frac{Ze^2}{r}\right)\right]^2 \tag{11.1.32}$$

と書け，これは有効ポテンシャル V の汎関数であり，変分することで V を決めるためのポアソン方程式を与える．

$$\begin{aligned}\delta E &= \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\, \delta V\, n - \frac{1}{4\pi e^2}\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\, \boldsymbol{\nabla}\delta V \cdot \boldsymbol{\nabla}\left(V + \frac{Ze^2}{r}\right) \\ &= \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\, \delta V \left[n + \frac{1}{4\pi e^2}\boldsymbol{\nabla}^2\left(V + \frac{Ze^2}{r}\right)\right] = 0\,. \end{aligned} \tag{11.1.33}$$

11.2　半古典的取り扱い：トーマス・フェルミ模型

ハートレー近似においては，まず $V(\boldsymbol{r})$ を選び，そしてシュレーディンガー方程式を解いた波動関数から，電子の密度分布を求め，それから新たに $V(\boldsymbol{r})$ を求めるという操作を繰り返す．さてここで特定の方向を他の方向から区別するものはないから，有効ポテンシャルが球対称である，つまり $V(\boldsymbol{r}) = V(r)$ であることに注意しよう．この状況のもとで，問題 8-9a で扱った WKB 近似を用いた近似法について議論しよう．

$$\frac{1}{\pi\hbar}\int_{r_1}^{r_2} \mathrm{d}r \sqrt{2m_{\mathrm{el}}\left[\mathcal{E} - V(r)\right] - \frac{\hbar^2\left(l+\frac{1}{2}\right)^2}{r^2}} = n_r + \frac{1}{2}\,. \tag{11.2.1}$$

ここで積分は根号の中が正となる，つまり古典的に許される領域について行う．個々のエネルギー固有値は $\mathcal{E}_{n_r+\frac{1}{2},l+\frac{1}{2}}$ で指定され，Z 個の電子を一番低い状態から $-\zeta$ のところまで満たすとする．

$$Z = \sum_a \eta(-\mathcal{E}_a - \zeta)\,. \tag{11.2.2}$$

ただし，和は多重度を考慮して

$$\sum_a \cdots = 2\sum_{n_r=0}^{\infty}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\cdots \tag{11.2.3}$$

となる．ここで $2l+1$ は軌道角運動量 l の多重度で，因子 2 はスピンの多重度である．これを使ってエネルギー E を次のように書くと都合がよい．

$$E = \underbrace{\sum_a (\mathcal{E}_a + \zeta)\eta(-\mathcal{E}_a - \zeta)}_{\equiv E_1} - \zeta Z - \frac{1}{8\pi e^2}\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}) \left[\boldsymbol{\nabla}\left(V + \frac{Ze^2}{r}\right)\right]^2\,. \tag{11.2.4}$$

ここで $E_1 - \zeta Z$ は式(11.1.32)における第 1 項目の和の部分である．階段関数 $\eta(-\mathcal{E}_a - \zeta)$ はもちろん占有されている状態を選ぶためで，$\mathcal{E}_a \leq -\zeta$ の場合に 1 となり，ζ の値は

式(11.2.2)より状態の数を数えて決定される．

しかし，ここでも $V(r)$ を知らない限り，議論を進めることはできない．つまり，V から出発して $\mathcal{E}_{n_r+\frac{1}{2},l+\frac{1}{2}}$ を求め E を計算していくことはできない．そこで V を見出す近似法の第1歩としてこれらの和を等価な積分に置き換える．そのためには次の式を思い出して欲しい．

$$\frac{1}{2\pi}\sum_{m=-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i}m(\phi-\phi')} = \delta(\phi-\phi') \quad \text{ただし} \quad -\pi<\phi,\phi'<\pi\,. \tag{11.2.5}$$

この式は $\phi-\phi' \to 2\pi x$ で $-\infty<x<\infty$ として

$$\sum_{m=-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}mx} = \sum_{p=-\infty}^{\infty} \delta(x-p) \tag{11.2.6}$$

の形に拡張できる．ここで両辺とも x に関しては周期が1の周期関数である．このいわゆるポアソンの和の公式の2つの例

$$\sum_{k=-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}k(\lambda-\frac{1}{2})} = \sum_{l=-\infty}^{\infty} \delta\left(\lambda-\tfrac{1}{2}-l\right)\,, \tag{11.2.7}$$

$$\sum_{j=-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}j(\nu-\frac{1}{2})} = \sum_{n_r=-\infty}^{\infty} \delta\left(\nu-\tfrac{1}{2}-n_r\right) \tag{11.2.8}$$

を使うと，一般的に関数の和は次のように書ける．

$$\begin{aligned}
&\sum_{n_r,l=0}^{\infty} f\left(n_r+\tfrac{1}{2},l+\tfrac{1}{2}\right)\\
&\qquad = \int_0^{\infty} \mathrm{d}\nu\,\mathrm{d}\lambda\, f(\nu,\lambda) \sum_{n_r,l=-\infty}^{\infty} \delta\left(\nu-\tfrac{1}{2}-n_r\right)\delta\left(\lambda-\tfrac{1}{2}-l\right)\\
&\qquad = \int_0^{\infty} \mathrm{d}\nu\,\mathrm{d}\lambda\, f(\nu,\lambda) \sum_{j,k=-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}\left[j(\nu-\frac{1}{2})+k(\lambda-\frac{1}{2})\right]}\,.
\end{aligned} \tag{11.2.9}$$

特に，これを式(11.2.4)のエネルギー E_1 に適用すると次のようになる．

$$\begin{aligned}
E_1 &= 2\sum_{n_r,l=0}^{\infty} 2\left(l+\tfrac{1}{2}\right)\left(\mathcal{E}_{n_r+\frac{1}{2},l+\frac{1}{2}}+\zeta\right)\eta\left(-\mathcal{E}_{n_r+\frac{1}{2},l+\frac{1}{2}}-\zeta\right)\\
&= 4\int_0^{\infty} \mathrm{d}\nu\,\mathrm{d}\lambda\,\lambda(\mathcal{E}_{\nu,\lambda}+\zeta)\eta(-\mathcal{E}_{\nu,\lambda}-\zeta) \sum_{j,k=-\infty}^{\infty} \mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}\left[j\left(\nu-\frac{1}{2}\right)+k\left(\lambda-\frac{1}{2}\right)\right]}\,.
\end{aligned} \tag{11.2.10}$$

上の式では $j=k=0$ の項以外はすべて振動する関数の積分である．そこでこの項だけを取り出し，これを歴史的な理由からトーマス*・フェルミ(TF)の半古典近似と

*Llewellyn Hilleth THOMAS (1903–1992)

呼ぶ．この近似でのエネルギーは

$$E_1^{\mathrm{TF}} = 4\int_0^\infty \mathrm{d}\nu\,\lambda\mathrm{d}\lambda\,(\mathcal{E}_{\nu,\lambda}+\zeta)\eta(-\mathcal{E}_{\nu,\lambda}-\zeta) \tag{11.2.11}$$

となる．ここで式(11.2.1)を以下のように書く．

$$\nu = \frac{1}{\pi}\int_{r_1}^{r_2} \mathrm{d}r\,\sqrt{\frac{2m_{\mathrm{el}}}{\hbar^2}(\mathcal{E}_{\nu,\lambda}-V)-\frac{\lambda^2}{r^2}}\,. \tag{11.2.12}$$

本質的には，式(11.2.4)における離散的な量子数 n_r, l の和が連続的な量子数 ν, λ の積分で近似されたことである．

式(11.2.12)は $\mathcal{E}_{\nu,\lambda}$ の定義と見なしてよい．しかし，これを関数 $\nu(\mathcal{E},\lambda)$ として扱い

$$\nu(\mathcal{E},\lambda) = \frac{1}{\pi}\int_{r_1}^{r_2} \mathrm{d}r\,\sqrt{\frac{2m_{\mathrm{el}}}{\hbar^2}(\mathcal{E}-V)-\frac{\lambda^2}{r^2}} \tag{11.2.13}$$

として，積分変数を ν から $\mathcal{E}$ に変更する方が便利である．これは部分積分を用いて行うことができる．まず

$$\mathrm{d}\nu\,(\mathcal{E}+\zeta)\eta(-\mathcal{E}-\zeta) = \mathrm{d}\Big[\underbrace{(\mathcal{E}+\zeta)\eta(-\mathcal{E}-\zeta)\nu}_{\text{積分の両端で消える}}\Big] - \nu\mathrm{d}\Big[(\mathcal{E}+\zeta)\eta(-\mathcal{E}-\zeta)\Big] \tag{11.2.14}$$

に注意し，$\mathrm{d}\big[(\mathcal{E}+\zeta)\eta(-\mathcal{E}-\zeta)\big] = \mathrm{d}\mathcal{E}\,\eta(-\mathcal{E}-\zeta)$ となることを使うと

$$\int_0^\infty \mathrm{d}\nu\,(\mathcal{E}+\zeta)\eta(-\mathcal{E}-\zeta) = -\int_{-\infty}^{-\zeta} \mathrm{d}\mathcal{E}\,\nu(\mathcal{E},\lambda) \tag{11.2.15}$$

となる．ここで $\nu = 0$ では $\mathcal{E}\to-\infty$ となることを使った．以上より次の結果を得る．

$$E_1^{\mathrm{TF}} = -4\int_0^\infty \mathrm{d}\lambda\,\lambda\int_{-\infty}^{-\zeta} \mathrm{d}\mathcal{E}\,\nu(\mathcal{E},\lambda)\,. \tag{11.2.16}$$

ここで上の式での被積分関数は

$$\begin{aligned}\lambda\nu(\mathcal{E},\lambda) &= \lambda\frac{\partial}{\partial\mathcal{E}}\frac{1}{\pi}\int \mathrm{d}r\,\frac{2}{3}\frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{el}}}\left(\frac{2m_{\mathrm{el}}}{\hbar^2}\big[\mathcal{E}-V(r)\big]-\frac{\lambda^2}{r^2}\right)^{\frac{3}{2}}\\ &= \frac{\partial}{\partial\lambda}\frac{\partial}{\partial\mathcal{E}}\frac{1}{4\pi^2}\int \underbrace{4\pi\mathrm{d}r\,r^2}_{\to(\mathrm{d}\boldsymbol{r})}\left(-\frac{2}{15}\right)\frac{\hbar^2}{2m_{\mathrm{el}}}\left(\frac{2m_{\mathrm{el}}}{\hbar^2}\big[\mathcal{E}-V(r)\big]-\frac{\lambda^2}{r^2}\right)^{\frac{5}{2}}\end{aligned} \tag{11.2.17}$$

のように書けるので，積分を実行して次の結果を得る．

$$E_1^{\mathrm{TF}} = -\frac{1}{15\pi^2\,m_{\mathrm{el}}\hbar^3}\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,\Big(2m_{\mathrm{el}}\big[-V(r)-\zeta\big]\Big)^{\frac{5}{2}}\,. \tag{11.2.18}$$

式(11.2.2)および式(11.2.4)での E_1 の定義を思い起こすと

$$\frac{\partial E_1}{\partial\zeta} = Z \tag{11.2.19}$$

が一般的に成立し，特に今扱っている TF 近似の場合は次のようになる．

$$Z = \frac{1}{3\pi^2\hbar^3}\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\left[2m_{\mathrm{el}}(-V-\zeta)\right]^{\frac{3}{2}} . \tag{11.2.20}$$

次に，式(11.1.25)での V の変分について見てみよう．これは

$$\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,\delta V\,n = \delta_V\sum_a \mathcal{E}_a = \delta_V\left(E_1-\zeta Z\right) = \delta_V E_1\Big|_{\zeta\ 定数} \tag{11.2.21}$$

のように書ける．ここでポテンシャルの変化に伴なう ζ の変化は以下のようになり，寄与しないことを使った．

$$\delta_\zeta(E_1-\zeta Z) = 0 . \tag{11.2.22}$$

したがって TF 近似における電子密度は，E_1^{TF} をポテンシャルで汎関数微分して

$$n(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{3\pi^2\hbar^3}\left[2m_{\mathrm{el}}\big(-V(\boldsymbol{r})-\zeta\big)\right]^{\frac{3}{2}} \tag{11.2.23}$$

となり，この結果は次のように式(11.2.20)と一致している．

$$\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,n(\boldsymbol{r}) = Z . \tag{11.2.24}$$

以上より，式(11.1.30)のポアソン方程式は

$$-\boldsymbol{\nabla}^2\left(V+\frac{Ze^2}{r}\right) = 4\pi e^2\frac{1}{3\pi^2\hbar^3}\left[2m_{\mathrm{el}}\big(-V-\zeta\big)\right]^{\frac{3}{2}} \tag{11.2.25}$$

と書け，次の境界条件を満たす $V(r)$ を未知関数とする，非線形な微分方程式となる．

$$rV \to -Ze^2 \quad (r\to 0) \qquad および \qquad V\to 0 \quad (r\to\infty) . \tag{11.2.26}$$

ここで関数 $V(r)$ の代わりに次の関数 f

$$-V-\zeta = \frac{Ze^2}{r}f \quad ただし \qquad f\to 1 \quad (r\to 0) \tag{11.2.27}$$

を導入し，極座標でのラプラシアンは式(7.5.6)で与えられることを思い起こして

$$\boldsymbol{\nabla}^2\left(-V-\zeta-\frac{Ze^2}{r}\right) = \boldsymbol{\nabla}^2\left(\frac{Ze^2}{r}(f-1)\right) = \frac{Ze^2}{r}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}r^2}f \tag{11.2.28}$$

と書けることに注意すると，方程式(11.2.25)は以下のような形になる．

$$\frac{\mathrm{d}^2 f}{\mathrm{d}r^2} = \frac{4\pi}{Z}\frac{r}{3\pi^2\hbar^3}\left(\frac{2m_{\mathrm{el}}Ze^2}{r}\right)^{\frac{3}{2}} f^{\frac{3}{2}} = \frac{4}{3\pi}\left(\frac{Z}{r}\right)^{\frac{1}{2}}\left(\frac{2f}{a_0}\right)^{\frac{3}{2}} . \tag{11.2.29}$$

ただし $a_0 = \hbar^2/(m_{\mathrm{el}}e^2)$ はボーア半径である．そして

$$r = aZ^{-\frac{1}{3}}x \tag{11.2.30}$$

のように変数変換すると，方程式は

$$\frac{\mathrm{d}^2 f(x)}{\mathrm{d}x^2} = \frac{\left[f(x)\right]^{\frac{3}{2}}}{x^{\frac{1}{2}}} \quad ただし \quad f(0) = 1 \tag{11.2.31}$$

となる．ただし a は次の式で与えられる．

$$a = \frac{1}{2}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{\frac{2}{3}} a_0 = 0.88534\, a_0\ . \tag{11.2.32}$$

この **TF 微分方程式**の重要な点は Z に依らず普遍的な形をしており，解は TF 関数 $f(x)$ であることである．

中性の原子に対する，x が大きいときの境界条件については議論が必要である．原子の端では電子の密度はゼロとならなければならないから，式(11.2.23)より

$$V + \zeta = 0 \tag{11.2.33}$$

の条件が必要となり，全電荷がゼロだから，ポテンシャルはゼロでなければならない．

$$V = 0 \quad \text{したがって} \quad \zeta = 0\ . \tag{11.2.34}$$

そしてまた，ガウスの定理より

$$Z = \frac{1}{4\pi^2 e^2} 4\pi r^2 \left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\right)\left(V + \frac{Ze^2}{r}\right)\bigg|_{\text{端}} = Z - \frac{r^2}{e^2}\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\bigg|_{\text{端}} \tag{11.2.35}$$

となるので，端での微分係数もゼロでなければならない．

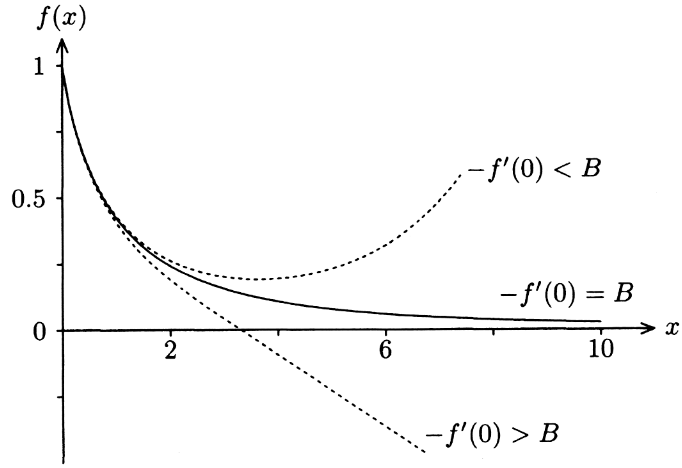
$$\frac{\mathrm{d}V}{\mathrm{d}r}\bigg|_{\text{端}} = 0\ . \tag{11.2.36}$$

これらをまとめると TF 関数 $f(x)$ は，'端' において次の条件を満たさなければならない．

$$f = 0 \quad \text{および} \quad f' \equiv \frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x} = 0\ . \tag{11.2.37}$$

中性の原子では，したがって端は $x = \infty$ である．

関数がどのような形になるかを見るために $x = 0$ で $f(0) = 1$ から，下向きの傾斜，つまり $f'(0) < 0$ として出発してみよう．すると $f'' = f\sqrt{f/x} > 0$ より，関数は常に上向きに曲がって行く．境界条件を満たす正しい $-f'(0)$ の値を B とすると，$-f'(0) >, =, < B$ に応じて定性的に3通りの可能性がある．図からわかるように，



$-f'(0) > B$ ならばある有限の x において $f = 0$ となるが $-f' \neq 0$ である．また $-f'(0) < B$ ならば有限の x において $f' = 0$ となるがそこでは $f \neq 0$ である．

もちろん，B の値つまり TF 関数の原点での傾きは数値的に積分すればわかる．しかしここではそれが定性的にどのようなものなのかを，TF 近似における重要なエネルギーとの関係式

$$E^{\mathrm{TF}} = -\frac{1}{15\pi^2}\frac{1}{m_{\mathrm{el}}\hbar^3}\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\big[2m_{\mathrm{el}}(-V-\zeta)\big]^{\frac{5}{2}} - \zeta Z \\ - \frac{1}{8\pi e^2}\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\left[\boldsymbol{\nabla}\left(V + \frac{Ze^2}{r}\right)\right]^2 \tag{11.2.38}$$

から見ておこう．$\zeta = 0$ とすると $V(r) = -(Ze^2/r)f(Z^{\frac{1}{3}}r/a) = -(Z^{\frac{4}{3}}e^2/a)\,f(x)/x$ だから

$$E^{\mathrm{TF}} = -\frac{Z^{\frac{7}{3}}e^2}{a}\left[\frac{1}{2}\int_0^\infty \mathrm{d}x\left(\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\right)^2 + \frac{2}{5}\int_0^\infty \mathrm{d}x\, x^{-\frac{1}{2}} f^{\frac{5}{2}}\right] \tag{11.2.39}$$

となる．ただし，ここで以下の関係式を使った．

$$\begin{aligned}\frac{aZ^{-\frac{7}{3}}}{4\pi e^2}\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\left[\boldsymbol{\nabla}\left(V + \frac{Ze^2}{r}\right)\right]^2 &= \int_0^\infty \mathrm{d}x\, x^2\left(\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\frac{f-1}{x}\right)^2 \\ &= \int_0^\infty \mathrm{d}x\left[\left(\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\right)^2 - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\frac{(f-1)^2}{x}\right] \\ &= \int_0^\infty \mathrm{d}x\left(\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}\right)^2 - \underbrace{\left.\frac{(f-1)^2}{x}\right|_{x=0}^{\infty}}_{=0}.\end{aligned} \tag{11.2.40}$$

明らかに，正しい解である f に対して

$$S \equiv \frac{1}{2}\int_0^\infty \mathrm{d}x\, f'^2 + \frac{2}{5}\int_0^\infty \mathrm{d}x\, x^{-\frac{1}{2}} f^{\frac{5}{2}} = -E^{\mathrm{TF}} \Big/ \frac{Z^{\frac{7}{3}} e^2}{a} \tag{11.2.41}$$

は，f の変化に対して不変でなければならない．実際 $f'' = f\sqrt{f/x}$ であり，さらに $f(0) = 1$ および $f(\infty) = 0$ より，$x = 0$ と $x = \infty$ において $\delta f = 0$ となるから，以下のように不変となる．

$$\begin{aligned}\delta S &= \int_0^\infty \mathrm{d}x \left[f' \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\delta f + x^{-\frac{1}{2}} f^{\frac{3}{2}} \delta f \right] \\ &= \underbrace{\int_0^\infty \mathrm{d}x\, \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} f'\delta f}_{= f'\delta f|_0^\infty} + \int_0^\infty \mathrm{d}x\, \delta f \left[-f'' + x^{-\frac{1}{2}} f^{\frac{3}{2}} \right] = 0\,. \end{aligned} \tag{11.2.42}$$

次のスケール変換 $f(x) \to f(\lambda x)$ について考えると，さらに多くのことがわかる．

$$S(\lambda) = \lambda \frac{1}{2}\int_0^\infty \mathrm{d}x\, f'^2 + \lambda^{-\frac{1}{2}} \frac{2}{5}\int_0^\infty \mathrm{d}x\, x^{-\frac{1}{2}} f^{\frac{5}{2}}\,. \tag{11.2.43}$$

この変換に対して

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\lambda} S(\lambda)\Big|_{\lambda=1} = 0 \quad \text{つまり} \quad \frac{1}{2}\int_0^\infty \mathrm{d}x\, f'^2 - \frac{1}{2}\frac{2}{5}\int_0^\infty \mathrm{d}x\, x^{-\frac{1}{2}} f^{\frac{5}{2}} = 0 \tag{11.2.44}$$

が成立しなければならないので

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x\, f'^2 = \frac{2}{5}\int_0^\infty \mathrm{d}x\, x^{-\frac{1}{2}} f^{\frac{5}{2}} \qquad (\text{正しい } f \text{ に対して}) \tag{11.2.45}$$

となる．ここで左辺は

$$\begin{aligned}\int_0^\infty \mathrm{d}x\, f'^2 &= \int_0^\infty \mathrm{d}x\, \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}(ff') - \int_0^\infty \mathrm{d}x\, ff'' \\ &= \underbrace{-f'(0)}_{=B} - \int_0^\infty \mathrm{d}x\, x^{-\frac{1}{2}} f^{\frac{5}{2}} \qquad (\text{正しい } f \text{ に対して}) \end{aligned} \tag{11.2.46}$$

となる．したがって，正しい f に対しては

$$\int_0^\infty \mathrm{d}x\, f'^2 = \frac{2}{7}B\,, \qquad \int_0^\infty \mathrm{d}x\, x^{-\frac{1}{2}} f^{\frac{5}{2}} = \frac{5}{7}B \tag{11.2.47}$$

となり，これより S は次のようになる．

$$S = \left(\frac{1}{7} + \frac{2}{7}\right) B = \frac{3}{7}B\,. \tag{11.2.48}$$

以上の結果から，エネルギーは S の停留値 $\frac{3}{7}B$ を使って次のように書ける．

$$-E^{\mathrm{TF}} = Z^{\frac{7}{3}} \frac{e^2}{a} \frac{3}{7} B\,. \tag{11.2.49}$$

ここで B の近似値を求めるための関係式を使う前に，この結果を別の見方で捉えてみ

よう．まず式(11.2.38)に返り，TF 近似の限りでは Z を整数に限る必要はないので，$\partial/\partial Z$ について考えてみよう．式(11.2.38)はそれに伴う V と ζ の変化に対しては安定なので寄与しない．したがってあらわな Z 依存性だけを考慮すればよく，結果は

$$\begin{aligned}\frac{\partial E^{\mathrm{TF}}}{\partial Z} &= -\frac{1}{4\pi}\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\boldsymbol{\nabla}\left(V+\frac{Ze^2}{r}\right)\cdot\boldsymbol{\nabla}\frac{1}{r}-\zeta \\ &= \frac{1}{4\pi}\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\left(V+\frac{Ze^2}{r}\right)\boldsymbol{\nabla}^2\frac{1}{r}-\zeta\end{aligned} \tag{11.2.50}$$

となる．または

$$\boldsymbol{\nabla}^2\frac{1}{r} = -4\pi\delta(\boldsymbol{r}) \tag{11.2.51}$$

を使って，$\zeta = 0$ とすると次のようになる．

$$\frac{\partial E^{\mathrm{TF}}}{\partial Z} = -\left(V+\frac{Ze^2}{r}\right)(0)\,. \tag{11.2.52}$$

この結果は次のように簡単に理解できる．$\partial E/\partial Z$ は原子核の存在する所に正の電荷を 1 個加えたときのエネルギー E の変化である．これは同じ場所に負の電荷を置いた場合のエネルギー E の変化の符号を変えたものである．ここで後者はちょうど $r=0$ の点にある電子が受ける，他の電子からの寄与まで含めた相互作用エネルギー，つまり $\left(V+Ze^2/r\right)(0)$ である．

ここで($\zeta=0$)，上の式の値を求めると

$$V+\left.\frac{Ze^2}{r}\right|_{r\to 0} = Z^{\frac{4}{3}}\frac{e^2}{a}\left.\frac{1-f(x)}{x}\right|_{x\to 0} = Z^{\frac{4}{3}}\frac{e^2}{a}B \tag{11.2.53}$$

となり，これよりエネルギーの変化は

$$\frac{\partial E^{\mathrm{TF}}}{\partial Z} = -Z^{\frac{4}{3}}\frac{e^2}{a}B \tag{11.2.54}$$

と書け，これは式(11.2.49)を微分した結果と一致する．

さて，ここで式(11.2.48)と(11.2.41)による B の計算に返ろう．問題 11-5 において示すが，S の停留値は最小値であり，したがって $\frac{3}{7}B \le S$ となる．ここで等号は $f(x)$ が TF 方程式の解のときに成り立つ．もちろんすべての試行関数は境界条件 $f(0)=1$ および $f(\infty)=0$ を満たさなければならない．

簡単な例として，次の試行関数

$$f(x) = \frac{1}{(1+\lambda x)^{\alpha}} \tag{11.2.55}$$

について考えてみよう．式(11.2.43)より

$$\frac{3}{7}B \lesssim \lambda S_1 + \lambda^{-\frac{1}{2}}S_2 \tag{11.2.56}$$

となる．ただし

$$S_1 = \frac{1}{2}\alpha^2\int_0^{\infty}\frac{\mathrm{d}x}{(1+x)^{2\alpha+2}} = \frac{1}{2}\frac{\alpha^2}{2\alpha+1} \tag{11.2.57}$$

であり，S_2 は $x=1/t-1$ を代入して，式(9.5.54)のオイラーのベータ関数を使うと次のようになる．

$$S_2 = \frac{2}{5}\int_0^\infty \mathrm{d}x\, x^{-\frac{1}{2}}(1+x)^{-\frac{5}{2}\alpha} = \frac{2}{5}\int_0^1 \mathrm{d}t\, t^{\frac{5}{2}\alpha-\frac{3}{2}}(1-t)^{-\frac{1}{2}}$$
$$= \frac{2}{5}\sqrt{\pi}\frac{(\frac{5}{2}\alpha-\frac{3}{2})!}{(\frac{5}{2}\alpha-1)!}\ . \tag{11.2.58}$$

ここで(11.2.56)を λ で微分することで，$\lambda=(\frac{1}{2}S_2/S_1)^{\frac{2}{3}}$ が最適値を与えることがわかり，推定値は

$$\frac{3}{7}B \lesssim \frac{3}{2}\left(2S_1S_2^2\right)^{\frac{1}{3}} \tag{11.2.59}$$

となり，ここへ S_1 と S_2 を代入すると次のようになる．

$$B \lesssim \frac{7}{5}\left(\frac{5}{3}\pi\right)^{\frac{1}{3}}\left[\frac{\alpha}{\sqrt{2\alpha+1}}\frac{(\frac{5}{2}\alpha-\frac{3}{2})!}{(\frac{5}{2}\alpha-1)!}\right]^{\frac{2}{3}}\ . \tag{11.2.60}$$

具体的に $\alpha=1,\frac{7}{5},\frac{3}{2},2$ とすると，それぞれ $B\lesssim 1.5960, 1.5908, 1.5910, 1.5940$ となる．これより $B\leq 1.5908$ となることは確かである．TF 関数の原点での傾き(符号を逆にした)の数値積分による結果は．

$$B = 1.588\,071 \tag{11.2.61}$$

である．つまり有効数字 3 桁まででは $B=1.59$ は正しい値であり，$\alpha=\frac{7}{5}$ とした変分計算による値は僅か 0.2% 大きいだけである．

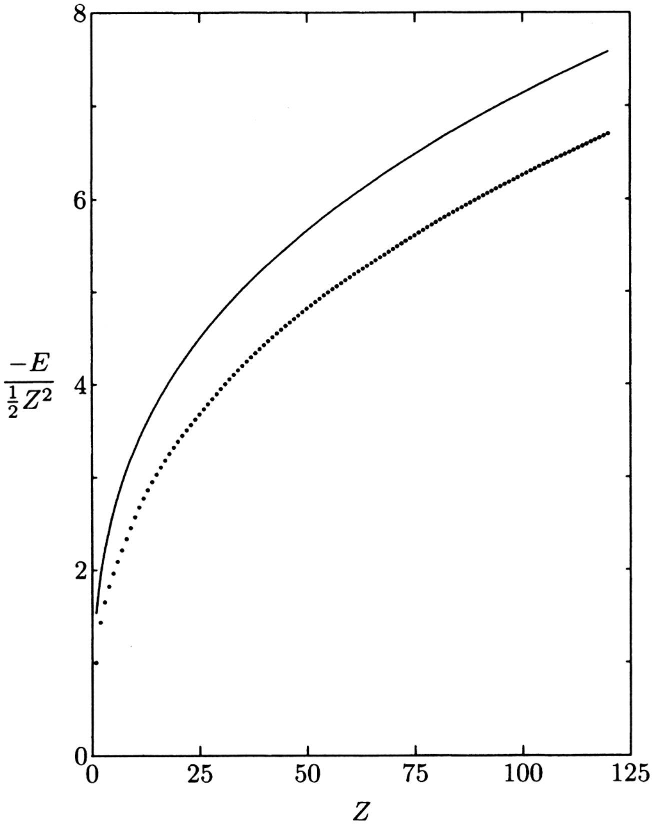
さて，束縛エネルギーについては

$$-E^{\mathrm{TF}} = \frac{3}{7}BZ^{\frac{7}{3}}\frac{e^2}{a} = \frac{3}{7}\frac{B}{a/a_0}BZ^{\frac{7}{3}}\frac{e^2}{a_0} = 0.7687\,Z^{\frac{7}{3}}\frac{e^2}{a_0} \tag{11.2.62}$$

となり，これを原子エネルギー単位 e^2/a_0 で測ると以下のように書ける．

$$\frac{-E^{\mathrm{TF}}}{\frac{1}{2}Z^2} = 1.537\,Z^{\frac{1}{3}} \qquad (\text{原子単位})\ . \tag{11.2.63}$$

ここで便宜上 $\frac{1}{2}Z^2$ で割ってあるために，エネルギーは周期律表で 1 からおよそ 6 までの値をとるようになる．



この図で点(小さな円)は，ハートレー・フォック法で計算された束縛エネルギー(原子単位)であり，これは値が得られている $Z=20$ 位までは実験値と一致している．これらの点は連続的な線で結びたくなるほど非常になめらかなので，式(11.2.63)の TF エネルギーは連続関数として，この実験値の図に重ねて書いておいた．全体の傾向は正しいが，しかし Z が大きくなると 2 本の曲線は外れていくという印象を受ける．実際にはそうではなくて，もっと重要なことは，誤差の割合は減少しているのである．$Z=1$ ではおよそ 50% だが，$Z=100$ ではおよそ 15% にまで減少する．$Z=27$, $Z^{1/3}=3$ ではおよそ 25% である．

11.3 強く束縛された電子に対する補正

式(11.2.10)の E_1 に寄与する振動項を考慮しないで，E^{TF} を改良することができるだろうか(なぜなら，図に示したデータからは振動している様子は見えないから)？そのためには，TF 近似がどこで破綻するかを理解するのがよい．鍵は式(11.2.23)で $\zeta=0$ とした次の式の局所的な性質にある．

$$n^{\mathrm{TF}}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{3\pi^2\hbar^3}\left[-2m_{\mathrm{el}}V(\boldsymbol{r})\right]^{\frac{3}{2}} . \tag{11.3.1}$$

実際に $n(\boldsymbol{r})$ を与える波動関数はもちろんその点から波長程度の範囲内の $V(\boldsymbol{r})$ の影響を受ける．したがって，波長の範囲内での V の変化の割合が十分小さければ，このことは重要ではないだろう．式で表すと次のように書ける．

$$\left|\lambda\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}V\right| \ll |V| \quad \text{ただし} \quad \lambda = \frac{\hbar}{p} \cong \frac{\hbar}{\sqrt{-2m_{\mathrm{el}}V}} . \tag{11.3.2}$$

ここで式(8.3.10)のビリアル定理より運動エネルギー $\boldsymbol{p}^2/(2m_{\mathrm{el}})$ とポテンシャルエネルギー V は大きさが同じオーダーであるとした．この式は次のようにも書ける．

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}r}\frac{1}{\sqrt{-V}} \ll \frac{\sqrt{m_{\mathrm{el}}}}{\hbar} = \frac{1}{\sqrt{a_0e^2}} . \tag{11.3.3}$$

ここで TF に特有の距離 r は $Z^{-\frac{1}{3}}a_0$ のオーダーであり，そこでの V は $Z^{\frac{4}{3}}e^2/a_0$ のオーダーであることに注意すると，上記の判断基準は次のように書ける．

$$\frac{Z^{\frac{1}{3}}}{a_0}\left(Z^{\frac{4}{3}}\frac{e^2}{a_0}\right)^{-\frac{1}{2}} \ll \left(a_0e^2\right)^{-\frac{1}{2}} \qquad \text{つまり} \qquad Z^{\frac{1}{3}} \gg 1 . \tag{11.3.4}$$

これが TF 近似での本質的なパラメーターである．さてここで，距離が十分小さく $r \ll Z^{-\frac{1}{3}}a_0$ で，そこではポテンシャルが $V \cong -Ze^2/r$ のオーダーである場合について考えてみると，上記の判断基準は以下のようになる．

$$\frac{1}{\sqrt{Ze^2r}} \ll \frac{1}{\sqrt{a_0e^2}} \qquad \text{つまり} \qquad r \gg \frac{a_0}{Z} . \tag{11.3.5}$$

つまり，r は電荷が Ze である原子核の最初のボーア軌道の半径よりずっと大きくなければならない．以上より次の条件を得る．

$$\frac{a_0}{Z} \ll r \ll \frac{a_0}{Z^{\frac{1}{3}}} . \tag{11.3.6}$$

この条件は，r が $Z^{-2/3}a_0$ のオーダー(もちろん $Z^{\frac{1}{3}} \gg 1$ を仮定して)，つまりエネルギーが $Ze^2/(Z^{-2/3}a_0) = Z^{\frac{5}{3}}e^2/a_0$ のオーダーである場合は満たされているとしてよい．しかし距離が $Z^{-1}a_0$ のオーダーとなり(束縛)エネルギーが Z^2e^2/a_0 のオーダーとなると条件は満たされない．つまり $-\mathcal{E} \gg Z^{\frac{5}{3}}e^2/a_0$ である強く束縛された電子が TF 近似の誤差の原因なのである．

これを修正するために，まず E_1 を ζ の関数と見なし(結局は $\zeta = 0$ とするのだが)

$$E_1(\zeta) = \left[E_1(\zeta) - E_1(\zeta_{\mathrm{s}})\right] + E_1(\zeta_{\mathrm{s}}) \tag{11.3.7}$$

と書こう．ただし ζ_{s} は $Z^{\frac{5}{3}}e^2/a_0$ のオーダーである．つまり，ここでは TF の近似がよくない強く束縛された電子からの寄与 $E_1(\zeta_{\mathrm{s}})$ と，TF 近似が信頼できる残りの部分 $E_1(\zeta) - E_1(\zeta_{\mathrm{s}})$ に分割したのである．強く束縛された電子に対しては $r \ll a_0/Z^{\frac{1}{3}}$ で

あり，f を展開して 1 次までとると，電子はポテンシャル

$$V \cong -\frac{Ze^2}{r}\left(1 - B\frac{r}{a}Z^{\frac{1}{3}}\right) = -\frac{Ze^2}{r} + B\frac{e^2}{a}Z^{\frac{4}{3}} \tag{11.3.8}$$

の中を運動している．これは本質的に原子核からのクーロンポテンシャルであり，したがって $E_1(\zeta_s)$ は正確に求めることができる．もちろん $E_1(\zeta)$ から振動項からの寄与は除くという一貫性のために，$E_1(\zeta_s)$ の非振動項だけを求めればよい．

まず初めに，$E_1(\zeta) - E_1(\zeta_s)$ を TF 近似で求めてみよう．

$$\begin{aligned}
&\left[E_1(\zeta = 0) - E_1(\zeta_s)\right]^{\mathrm{TF}} \\
&\quad = -\frac{1}{15\pi^2}\frac{1}{m_{\mathrm{el}}\hbar^3}\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\left[2m_{\mathrm{el}}(-V)\right]^{\frac{5}{2}} \\
&\qquad + \frac{1}{15\pi^2}\frac{1}{m_{\mathrm{el}}\hbar^3}\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\left[2m_{\mathrm{el}}\left(-\zeta_s - B\frac{e^2}{a}Z^{\frac{4}{3}} + \frac{Ze^2}{r}\right)\right]^{\frac{5}{2}} .
\end{aligned} \tag{11.3.9}$$

右辺の第 2 項目の積分は

$$\zeta_s + B\frac{e^2}{a}Z^{\frac{4}{3}} = \frac{Ze^2}{r_s} \tag{11.3.10}$$

として，$r \leq r_s$ の領域での積分であり，結果は

$$\begin{aligned}
&\frac{4\pi}{15\pi^2}\frac{1}{m_{\mathrm{el}}\hbar^3}(2m_{\mathrm{el}}Ze^2)^{\frac{5}{2}}\int_0^{r_s}\mathrm{d}r\,r^2\left(\frac{1}{r} - \frac{1}{r_s}\right)^{\frac{5}{2}} \\
&\quad = \frac{32}{15\pi}\frac{Z^2e^2}{a_0}\underbrace{\left(\frac{m_{\mathrm{el}}e^2}{\hbar^2}a_0\right)^{\frac{3}{2}}}_{=1}\left(\frac{Zr_s}{2a_0}\right)^{\frac{1}{2}}\underbrace{\int_0^1\mathrm{d}t\,t^{-\frac{1}{2}}(1-t)^{\frac{5}{2}}}_{=5\pi/16} \\
&\quad = \frac{2}{3}\frac{Z^2e^2}{a_0}\left(\frac{Zr_s}{2a_0}\right)^{\frac{1}{2}} = \frac{2}{3}\frac{Z^2e^2}{a_0}n_s
\end{aligned} \tag{11.3.11}$$

となる．ただし，ここで次の連続的な有効量子数 n_s を導入した．

$$r_s = \frac{2a_0}{Z}n_s^2 \quad \text{または} \quad \zeta_s + B\frac{e^2}{a}Z^{\frac{4}{3}} = \frac{Z^2e^2}{2a_0n_s^2} . \tag{11.3.12}$$

さて次に，状態の多重度 $2n^2$ を考慮してボーアエネルギーについて和をとると，$E_1(\zeta_s)$ は

$$\begin{aligned}
E_1(\zeta_s) &= \sum_{n=1}^{\infty}2n^2\underbrace{\left(-\frac{Z^2e^2}{2a_0n^2} + B\frac{e^2}{a}Z^{\frac{4}{3}} + \zeta_s\right)}_{=\frac{Z^2e^2}{2a_0}\left(-\frac{1}{n^2}+\frac{1}{n_s^2}\right)}\eta\left(\frac{1}{n^2} - \frac{1}{n_s^2}\right) \\
&= \frac{Z^2e^2}{a_0}\sum_{n=1}^{\lfloor n_s\rfloor}\left(-1 + \frac{n^2}{n_s^2}\right)
\end{aligned} \tag{11.3.13}$$

となる．ここで $\lfloor n_\mathrm{s} \rfloor$ は n_s を越えない最大の整数を表す．これらの結果より，強く束縛された電子に対する扱いを改良することによる補正項は，エネルギーに対して

$$\frac{Z^2e^2}{a_0}\left[\frac{2}{3}n_\mathrm{s}+\sum_{n=1}^{\lfloor n_\mathrm{s}\rfloor}\left(\frac{n^2}{n_\mathrm{s}^2}-1\right)\right] \tag{11.3.14}$$

となる．ただしこの項はまだ振動項を含んでおり，それを区別して除かなければならない．

ここでまず行うことは，上の式の和をなめらかな部分と振動する部分に分けることである．そこで，次のポアソンの和の公式 (11.2.6)

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty}\delta(x-n)=1+2\sum_{m=1}^{\infty}\cos(2\pi mx) \tag{11.3.15}$$

から出発し，x について $\epsilon(0<\epsilon<1)$ から n_s まで積分してみよう．

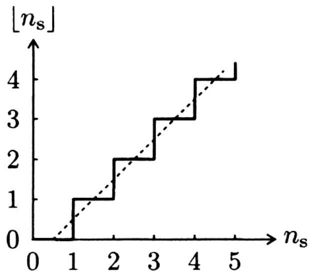
$$\begin{aligned}\int_\epsilon^{n_\mathrm{s}}\mathrm{d}x\sum_{n=-\infty}^{\infty}\delta(x-n)&=\sum_{n=1}^{\lfloor n_\mathrm{s}\rfloor}1=\lfloor n_\mathrm{s}\rfloor\\&=n_\mathrm{s}+\frac{1}{\pi}\sum_{m=1}^{\infty}\frac{\sin(2\pi mn_\mathrm{s})}{m}\\&\qquad-\underbrace{\left[\epsilon+\frac{1}{\pi}\sum_{m=1}^{\infty}\frac{\sin(2\pi m\epsilon)}{m}\right]}_{=\frac{1}{2}}.\end{aligned} \tag{11.3.16}$$

ここで左辺は ϵ に依存しないから，右辺の ϵ を含む項は定数でなければならない．$\epsilon=\frac{1}{2}$ とするとこの定数は $\frac{1}{2}$ であることがわかる．しかしもし $\epsilon=+0$ とするとこの値はゼロになるのではないだろうか？ いや，実はそうではない．無限小の正の ϵ に対しては無限の和はゼロとはならないことに注意することが重要である．実際，十分大きな m に対しては積分が適用でき，結果は以下のようになる．

$$\frac{1}{\pi}\sum_{m=1}^{\infty}\frac{\sin\bigl(2\pi m(+0)\bigr)}{m}=\frac{1}{\pi}\int^{\infty}\frac{\mathrm{d}m}{m}\sin\bigl(2\pi m(+0)\bigr)=\frac{1}{\pi}\int_0^{\infty}\frac{\mathrm{d}t}{t}\sin t=\frac{1}{2}\,. \tag{11.3.17}$$

したがって

$$\lfloor n_\mathrm{s}\rfloor=\underbrace{n_\mathrm{s}-\tfrac{1}{2}}_{\text{なめらかな部分}}+\underbrace{\frac{1}{\pi}\sum_{m=1}^{\infty}\frac{\sin(2\pi mn_\mathrm{s})}{m}}_{\text{振動する部分}} \tag{11.3.18}$$



となり，$\lfloor n_s \rfloor$ をなめらかな部分と振動する部分に分けることができる．

より一般的に，式(11.3.15)に $x^k\,(k=1,2,\ldots)$ を掛けて，部分積分を繰り返し用いると次のようになる．

$$\sum_{n=1}^{\lfloor n_s \rfloor} n^k = \int_{\frac{1}{2}}^{n_s} \mathrm{d}x\, x^k \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(x-n)$$
$$= \left[\frac{x^{k+1}}{k+1} + 2\mathrm{Re}\sum_{j=0}^{k}(-1)^{k-j}\frac{j!}{k!}x^j \sum_{m=1}^{\infty}\frac{\mathrm{e}^{\mathrm{i}2\pi m x}}{(\mathrm{i}2\pi m)^{1+k-j}}\right]\Bigg|_{x=\frac{1}{2}}^{n_s} . \qquad (11.3.19)$$

ここで，和の公式

$$2\sum_{m=1}^{\infty}\frac{\cos(\pi m)}{(2\pi m)^2} = \frac{1}{2\pi^2}\sum_{m=1}^{\infty}\frac{(-1)^m}{m^2} = -\frac{1}{24} \qquad (11.3.20)$$

を用いると，$k=1$ に対しては

$$\sum_{n=1}^{\lfloor n_s \rfloor} n = \underbrace{\frac{1}{2}{n_s}^2 - \frac{1}{12}}_{\text{なめらかな部分}} \underbrace{+2\sum_{m=1}^{\infty}\left[n_s\frac{\sin(2\pi m n_s)}{2\pi m} + \frac{\cos(2\pi m n_s)}{(2\pi m)^2}\right]}_{\text{振動する部分}} \qquad (11.3.21)$$

となり，また同様にして $k=2$ に対しては

$$\sum_{n=1}^{\lfloor n_s \rfloor} n^2 = \underbrace{\frac{1}{3}{n_s}^3}_{\text{なめらかな部分}} \underbrace{+2\sum_{m=1}^{\infty}\left[{n_s}^2\frac{\sin(2\pi m n_s)}{2\pi m} + 2n_s\frac{\cos(2\pi m n_s)}{(2\pi m)^2} - 2\frac{\sin(2\pi m n_s)}{(2\pi m)^3}\right]}_{\text{振動する部分}}$$
$$(11.3.22)$$

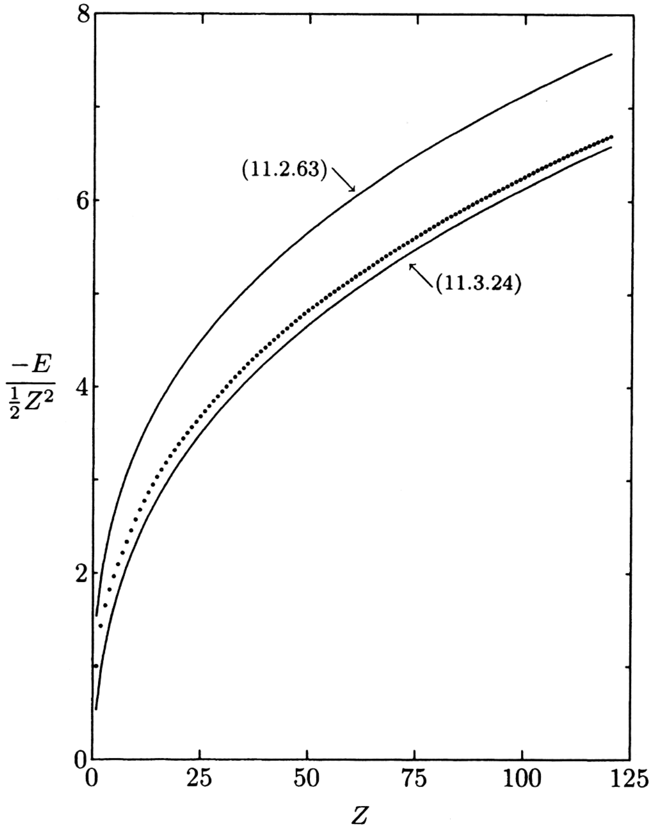
となる．以上より，式(11.3.14)のなめらかな部分は次のようになる．

$$\frac{Z^2e^2}{a_0}\left[\frac{2}{3}n_s + \frac{\frac{1}{3}{n_s}^3}{{n_s}^2} - \left(n_s - \frac{1}{2}\right)\right] = \frac{1}{2}Z^2\frac{e^2}{a_0} . \qquad (11.3.23)$$

全体の結果は，当然そうであるように n_s に依存していない．そして，強く束縛された電子に対する補正は，エネルギーに対して原子単位で $\frac{1}{2}Z^2$ であることがわかる．したがって，式(11.2.63)は次のように修正される．

$$\frac{-E}{\frac{1}{2}Z^2} = 1.537\,Z^{\frac{1}{3}} - 1 \qquad (\text{原子単位}) . \qquad (11.3.24)$$

下図の 2 番目の曲線は，最も内側にある電子に対するこれらの補正が状況をいかにすばらしく改善しているかを示している．



11.4　量子補正と交換エネルギー

それでは残っている不一致の原因は何なのだろうか？ どこを見ればよいのだろうか？ 問題 11-3 は，TF 近似は古典的極限であり，その近似では $E^{\rm TF}$ は古典的な位相空間の積分(スピン自由度の 2 まで含める)で与えられることを示している．

$$E_1^{\rm TF}(\zeta) = 2\int \frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{r})(\mathrm{d}\boldsymbol{p})}{(2\pi\hbar)^3}\big(H(\boldsymbol{r},p)+\zeta\big)\eta\big(-H(\boldsymbol{r},p)-\zeta\big)\ . \tag{11.4.1}$$

これは

$$E_1 = \mathrm{tr}\,\{(H+\zeta)\eta(-H-\zeta)\} \tag{11.4.2}$$

に対する半古典近似の主要項である．ただし H は次の 1 体のハミルトニアンである．

$$H(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}) = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_{\rm el}} + V(\boldsymbol{r})\ . \tag{11.4.3}$$

このことから，$E_1^{\rm TF}$ に対する第一次量子補正をまず考察すればよいだろうということが示唆される．

そのためには，問題 6-17b の結果を

$$\omega^2 = \frac{1}{M}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}V(x) \longrightarrow \frac{1}{m_{\mathrm{el}}}\boldsymbol{\nabla}^2 V(\boldsymbol{r}) \tag{11.4.4}$$

が本質的な量であることに注意して，1 次元から 3 次元に拡張すればよい．これより，E_1^{TF} に対する主要な量子補正は

$$\begin{aligned} E_1^{\mathrm{qm}} &= -2\int \frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,(\mathrm{d}\boldsymbol{p})}{(2\pi\hbar)^3}\,\frac{\hbar^2}{24m_{\mathrm{el}}}\,\boldsymbol{\nabla}^2 V\,\frac{\partial^2}{\partial h^2}h\eta(-h)\Big|_{h\,=\,H(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p})\,+\,\zeta} \\ &= 2\int \frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,(\mathrm{d}\boldsymbol{p})}{(2\pi\hbar)^3}\,\frac{\hbar^2}{24m_{\mathrm{el}}}\,\boldsymbol{\nabla}^2 V\,\delta\Big(-\frac{\boldsymbol{p}^2}{2m_{\mathrm{el}}} - V(\boldsymbol{r}) - \zeta\Big) \end{aligned} \tag{11.4.5}$$

となり，これを運動量で積分すると次のようになる．

$$E_1^{\mathrm{qm}} = \frac{1}{24\pi^2\hbar}\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,\boldsymbol{\nabla}^2 V\,\big[2m_{\mathrm{el}}(-V-\zeta)\big]^{\frac{1}{2}}\ . \tag{11.4.6}$$

ここで出てきたのは

$$\boldsymbol{\nabla}^2 V(\boldsymbol{r}) = 4\pi Ze^2\delta(\boldsymbol{r}) - 4\pi e^2 n(\boldsymbol{r}) \tag{11.4.7}$$

となる $\boldsymbol{\nabla}^2 V$ であり，$\boldsymbol{\nabla}^2(V+Ze^2/r)$ ではないことに注意しよう．しかし，ここで強く束縛された電子に対しては特別の取り扱いをしたことを忘れてはいけない．求めたいものは

$$\big[E_1(\zeta) - E_1(\zeta_{\mathrm{s}})\big]^{\mathrm{qm}} \tag{11.4.8}$$

であり，$E_1(\zeta_{\mathrm{s}})$ は，$\boldsymbol{\nabla}^2 V_{\mathrm{s}} = 4\pi Ze^2\delta(\boldsymbol{r})$ となるポテンシャル $V_{\mathrm{s}} = -Ze^2/r+(B/a)Z^{\frac{4}{3}}$ から計算されている．したがって，強く束縛された電子に必要な補正は，$\delta(\boldsymbol{r})$ からの寄与を除くことになり，量子補正の項は以下のようになる．

$$\Delta_{\mathrm{qm}}E = \frac{1}{24\pi^2\hbar}\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,\boldsymbol{\nabla}^2\left(V+\frac{Ze^2}{r}\right)\,\big[2m_{\mathrm{el}}(-V-\zeta)\big]^{\frac{1}{2}}\ . \tag{11.4.9}$$

これは TF エネルギーへの小さな補正なので，TF ポテンシャルに対する式(11.2.25)の微分方程式を使うことができ，以下のようになる．

$$\begin{aligned} \Delta_{\mathrm{qm}}E &= -\frac{1}{18\pi^3}\frac{e^2}{\hbar^4}\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,\big[2m_{\mathrm{el}}(-V-\zeta)\big]^2 \\ &= -\frac{2}{9\pi^3}\frac{1}{a_0^2e^2}\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,\big[-V(\boldsymbol{r})-\zeta\big]^2\ . \end{aligned} \tag{11.4.10}$$

この補正は TF パラメーター $r = Z^{-\frac{1}{3}}ax$ および $V+\zeta = -Z^{\frac{4}{3}}(e^2/a)f(x)/x$ を使うと

$$\Delta_{\mathrm{qm}}E = -\underbrace{\frac{8}{9\pi^2}\frac{a}{a_0}}_{=\frac{1}{4}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{-\frac{4}{3}}}Z^{\frac{5}{3}}\frac{e^2}{a_0}\int_0^\infty \mathrm{d}x\,\big[f(x)\big]^2 \tag{11.4.11}$$

となり，中性原子の TF 関数 $f(x)$ に対しては，積分値は 0.615 435 なので以下の結果を得る．

$$\Delta_{\rm qm} E = -0.04907\, Z^{\frac{5}{3}} \frac{e^2}{a_0} \,. \tag{11.4.12}$$

次に，交換項について考察しよう．そのためには式(11.1.13)に返り，以下の交換項のスピンの和を具体的に書いておこう．

$$E_{\rm ex} = -\frac{1}{2}\sum_{a,b}\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})(\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\sum_{\sigma,\sigma'}\phi_a(\boldsymbol{r},\sigma)^*\phi_b(\boldsymbol{r}',\sigma')^* v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\phi_a(\boldsymbol{r}',\sigma')\phi_b(\boldsymbol{r},\sigma)\,. \tag{11.4.13}$$

ここで，たとえば直交性より

$$\sum_\sigma \phi_a(\boldsymbol{r},\sigma)^*\phi_b(\boldsymbol{r},\sigma) = 0 \quad (a, b\ \text{が異なるスピン状態のとき}) \tag{11.4.14}$$

となるので，a, b 対が同じスピンを持つ場合のみ寄与し，全体で 2 通りなので式(11.1.2)のクーロンポテンシャル $v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ に対しては

$$E_{\rm ex} = -e^2 \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})(\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\frac{\sum_a \phi_a(\boldsymbol{r})^*\phi_a(\boldsymbol{r}')\sum_b \phi_b(\boldsymbol{r}')^*\phi_b(\boldsymbol{r})}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} \tag{11.4.15}$$

となる．半古典的な TF 極限では，波動関数は式(10.8.12)で与えられる

$$\phi_a(\boldsymbol{r}) = \sqrt{\frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{p})}{(2\pi\hbar)^3}}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{r}} \quad \text{ただし} \quad |\boldsymbol{p}| < \sqrt{2m_{\rm el}(-V-\zeta)} \equiv P \tag{11.4.16}$$

の形をしているので，交換項は以下のようになる．

$$E_{\rm ex} = -e^2 \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})(\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{p})}{(2\pi\hbar)^3}\frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{p}')}{(2\pi\hbar)^3}\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\,. \tag{11.4.17}$$

まず $\boldsymbol{r}'$ について積分しよう．ここでは $\boldsymbol{r}$ の $\hbar/P$ 程度の近傍のみが寄与し，これはクーロンポテンシャルのフーリエ変換であり，結果は以下のようになる．

$$\begin{aligned}
&\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\frac{\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} \\
&= \frac{\hbar^2}{(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')^2}\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\left(-\boldsymbol{\nabla}'^2\right)\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')} \\
&= \frac{\hbar^2}{(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')^2}\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\underbrace{\left(-\boldsymbol{\nabla}'^2\right)\frac{1}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}_{=4\pi\delta(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r})} \\
&= \frac{4\pi\hbar^2}{(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')^2}\,.
\end{aligned} \tag{11.4.18}$$

したがって式(11.4.17)は

$$E_{\rm ex} = -\frac{4\pi e^2}{(2\pi)^6\hbar^4}\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\int \frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{p})(\mathrm{d}\boldsymbol{p}')}{(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')^2} \tag{11.4.19}$$

となる．ただし2個の運動量の積分の範囲は $|\boldsymbol{p}|, |\boldsymbol{p}'| < P(\boldsymbol{r}) = \sqrt{2m_{\rm el}(-V(\boldsymbol{r})-\zeta)}$ で指定され，問題11-11の結果を使うと

$$\begin{aligned} E_{\rm ex} &= -\frac{4\pi}{(2\pi)^4}\frac{e^2}{\hbar^4}\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\left[2m_{\rm el}\big(-V(\boldsymbol{r})-\zeta\big)\right]^2 \\ &= -\frac{1}{\pi^3}\frac{1}{e^2a_0^2}\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\left[-V(\boldsymbol{r})-\zeta\right]^2 \end{aligned} \tag{11.4.20}$$

となり，式(11.4.10)と比べると，次の結果を得る．

$$E_{\rm ex} = \frac{9}{2}\Delta_{\rm qm}E\ . \tag{11.4.21}$$

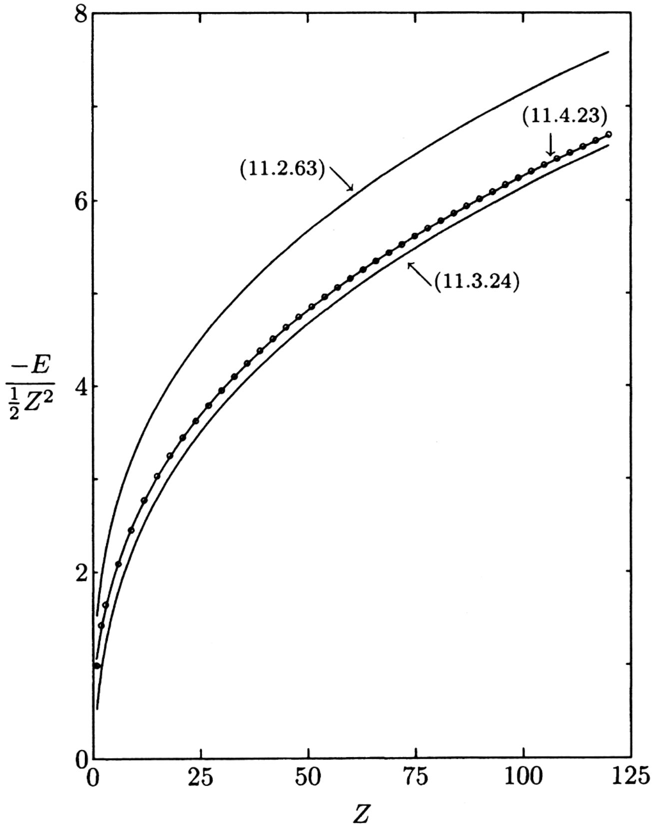
したがって，量子補正と交換項の寄与の和は

$$E_{\rm ex} + \Delta_{\rm qm}E = \frac{11}{2}\Delta_{\rm qm}E = -\underbrace{\frac{11}{8}\left(\frac{3\pi}{4}\right)^{-\frac{4}{3}}\int_0^\infty \mathrm{d}x\left[f(x)\right]^2}_{=0.2699} Z^{\frac{5}{3}}\frac{e^2}{a_0} \tag{11.4.22}$$

となり，式(11.3.24)にこの結果を加えると次のようになる．

$$\frac{-E_{\rm smooth}}{\frac{1}{2}Z^2} = 1.537\,Z^{\frac{1}{3}} - 1 + 0.540\,Z^{-\frac{1}{3}} \qquad （原子単位）. \tag{11.4.23}$$

下図に「実験」値と比べるための3番目の曲線を示す．



この曲線は実験値を示す小さな円の上に，$Z = 1$(ここでは 7.7% 上方にある)を除いて乗っている！ 3 番目の曲線がはっきりと見えるように，3 分の 2 のデータを除き $Z = 1, 2, 3, 6, 9, \ldots, 120$ に対する円を 399 ページおよび 404 ページより大きな円で示してある．このようにして，3 段階を経て 399 ページで最初に示したハートレー・フォックエネルギーのなめらかな Z 依存性を理解することができた．

11.5　エネルギー振動

前節の成功でやめにしようか？ いや，そうはいかない．振動項からの寄与を見なければならない．ではそれがどこで現れるだろうか？ それがあるのは n_r と l が整数でなければならないから，別の言い方をすれば，個々の電子が離散的であるからである．それとは対照的に TF の方法は，全電子数があたかも連続であるかのように，電子を無限に小さく分割できると見なしている．このことから予想される誤差は，おおよそ電子の電荷 e と全体の電荷 Ze(中性原子)の比 $1/Z$ 程度であるに違いない．式(11.2.62)の TF エネルギー $E^{\text{TF}} \propto Z^{7/3}$ と比べると，これは $Z^{\frac{4}{3}}$ 程度となり，通常では 1 桁程

度小さい.

これらの振動項の構造について何かを予想できるだろうか？ 式(11.2.10)を思い出そう.

$$E_1 = 4\int \mathrm{d}\nu\, \mathrm{d}\lambda\, \lambda\, (\mathcal{E}_{\nu,\lambda} + \zeta)\, \eta\, (-\mathcal{E}_{\nu,\lambda} - \zeta) \sum_{j,k} \mathrm{e}^{2\pi\mathrm{i}\, [j(\nu - \frac{1}{2}) + k(\lambda - \frac{1}{2})]} \,. \quad (11.5.1)$$

ここで主な寄与は，λ が最大値($\equiv \Lambda$)に近い領域，つまり，強め合うように干渉する領域から来ると予想できる．さて，式(11.2.12)の関係式

$$\nu = \frac{1}{\pi} \int \frac{\mathrm{d}r}{r} \sqrt{\frac{2m_{\mathrm{el}}}{\hbar^2} r^2 (\mathcal{E} - V) - \lambda^2} \quad (11.5.2)$$

より

$$\nu \geq 0 \quad および \quad \mathcal{E} \leq -\zeta \quad (11.5.3)$$

の条件があるので，λ が最大となるのは，最小の ν，つまり $\nu = 0$ で，最大の $\mathcal{E}$，つまり $\mathcal{E} = 0$(中性原子では $\zeta = 0$)のときである．したがって，最大値は以下で与えられる.

$$\begin{aligned} \Lambda^2 &= \operatorname*{Max}_r \left\{ \frac{2m_{\mathrm{el}}}{\hbar^2} r^2 \left[-V(r) \right] \right\} \\ &= Z^{2/3} \frac{2a}{a_0} \operatorname*{Max}_x \{ x f(x) \} \\ &= \left[Z^{1/3} \left(\frac{3\pi}{4} \right)^{\frac{1}{3}} \sqrt{x_{\max} f(x_{\max})} \right]^2 . \end{aligned} \quad (11.5.4)$$

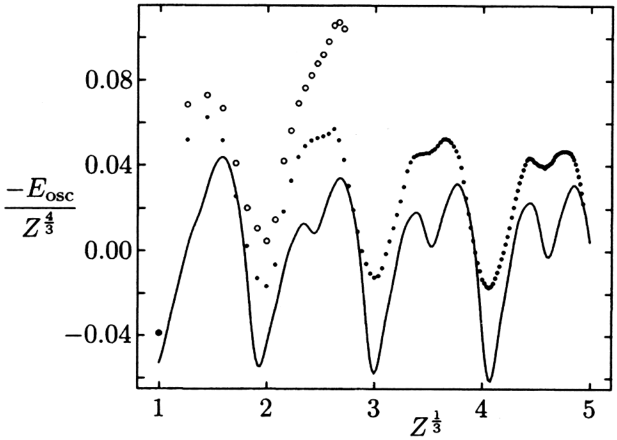
$f(x)$ を数値的に計算すると，$xf(x)$ の最大値は $x_{\max} = 2.104$ のときで，そのときの f の値 $f(x_{\max}) = 0.2312$ より次の結果を得る.

$$\Lambda = 0.928 Z^{\frac{1}{3}} \,. \quad (11.5.5)$$

このことは次の量を $Z^{\frac{1}{3}}$ の関数として見ることを示唆している.

$$\frac{-E_{\mathrm{osc}}}{Z^{\frac{4}{3}}} \equiv \frac{(-E) - (-E_{\mathrm{smooth}})}{Z^{\frac{4}{3}}} \,. \quad (11.5.6)$$

これを図に示した(ここでもまた原子単位を使った).



ここでハートレー・フォックの結果は小さい円で示され，大きな円は実験値を表す(ただし，なめらかな相対論的補正を含む)．確かに振動している！そして，その周期は実際ほぼ $Z^{\frac{1}{3}}$ に近い．主要項のみを考慮した計算結果は連続曲線である．この図は振動項のみについて触れており，$Z^{\frac{4}{3}}$ 程度の大きさを持つなめらかな項は含んでいない．また，主要な項が $\frac{1}{8}Z^2(Z\alpha)^2$ ($\alpha \cong 1/137$ はゾンマーフェルトの微細構造定数である)の相対論的寄与も含んでいない．この点を考慮すると，この大きさと振動構造の一致はすばらしいものである．

問題

11-1a　次のハミルトニアン

$$H = \underbrace{\sum_{j=1}^{2} \frac{\boldsymbol{p}_j^2}{2m_{\mathrm{el}}}}_{\equiv H_{\mathrm{kin.}}} \underbrace{-\sum_{j=1}^{2} \frac{Ze^2}{|\boldsymbol{r}_j|}}_{\equiv H_{\mathrm{n\text{-}e}}} + \underbrace{\frac{e^2}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|}}_{\equiv H_{\mathrm{e\text{-}e}}}$$

で記述される2電子原子の基底状態のエネルギーを変分法で評価するために，全角運動量がゼロ(スピン状態が反対称)で軌道部分の対称的な波動関数が次の式で与えられる状態について考察する．

$$\psi(\boldsymbol{r}'_1, \boldsymbol{r}'_2) = C\left(\mathrm{e}^{-Z(\alpha r'_1 + \beta r'_2)/a_0} + \mathrm{e}^{-Z(\beta r'_1 + \alpha r'_2)/a_0}\right) .$$

ここで $r'_1 = |\boldsymbol{r}'_1|$，$r'_2 = |\boldsymbol{r}'_2|$ であり，$\alpha, \beta > 0$ とする．まず，規格化定数 C(正)を決めよ．そして H の3項の期待値が次の式で与えられることを示せ．

$$\langle H_{\text{kin.}}\rangle\Big/\frac{e^2}{a_0}=\frac{1}{2}Z^2\left[\frac{\alpha^2+\beta^2}{(\alpha\beta)^3}+2\alpha\beta\left(\frac{2}{\alpha+\beta}\right)^6\right]\Big/\left[\frac{1}{(\alpha\beta)^3}+\left(\frac{2}{\alpha+\beta}\right)^6\right],$$

$$\langle H_{\text{n-e}}\rangle\Big/\frac{e^2}{a_0}=-Z^2(\alpha+\beta),$$

$$\langle H_{\text{e-e}}\rangle\Big/\frac{e^2}{a_0}=\frac{1}{8}Z\left(\frac{2}{\alpha+\beta}\right)^3\left[\frac{1}{\alpha^2}+\frac{1}{\beta^2}+\frac{3}{\alpha\beta}+5\left(\frac{2}{\alpha+\beta}\right)^2\right]$$
$$\times\left[\frac{1}{(\alpha\beta)^3}+\left(\frac{2}{\alpha+\beta}\right)^6\right]^{-1}.$$

どうして $\alpha\leftrightarrow\beta$ の交換に対して，これらの期待値が変化しないことが予想できるのか？

11-1b　まず簡単のため $\alpha=\beta$ として，$\langle H\rangle$ を最小にする α を求めよ．この結果は安定な H^- イオンが存在することを説明するのに十分よい近似となっているか？

11-1c　α と β 両方について最適とするための便利なパラメーターとして次の x,y を導入する．

$$x=\frac{\frac{1}{2}(\alpha+\beta)}{\sqrt{\alpha\beta}},\qquad y=\sqrt{\alpha\beta}.$$

まず $\langle H\rangle$ が y の2次関数であることを示し，$x\geq 1$（なぜこの制限がつくのか?）に対して最適の y を求めよ．そして次に x の最適値を求めよ．この結果は十分よい近似か？

11-1d　上記の両方の結果と次の実験値との比較をせよ．

$$-E=0.52776,\ 2.9038,\ 7.2804,\ 13.657,22.036\ \times e^2/a_0\quad(Z=1,\ldots,5).$$

11-2a　相互作用をしない電子が ν 番目のボーア殻まで詰まっているときのエネルギーは

$$E=\sum_{n=1}^{\nu}2n^2\left(-\frac{Z^2}{2n^2}\right)=-Z^2\nu\qquad(\text{原子エネルギー単位})$$

となる．N 電子に対して次の式を示せ．

$$N=\sum_{n=1}^{\nu}2n^2=\tfrac{2}{3}(\nu+\tfrac{1}{2})^3-\tfrac{1}{6}(\nu+\tfrac{1}{2}).$$

また，十分大きな N に対して近似式

$$\nu=\left(\tfrac{3}{2}N\right)^{\frac{1}{3}}-\tfrac{1}{2}+\tfrac{1}{12}\left(\tfrac{3}{2}N\right)^{-\frac{1}{3}}+\cdots$$

および

$$-E = Z^2\left[\left(\tfrac{3}{2}N\right)^{\frac{1}{3}} - \tfrac{1}{2} + \tfrac{1}{12}\left(\tfrac{3}{2}N\right)^{\frac{1}{3}} + \cdots\right]$$
$$\underbrace{=}_{\uparrow\, N=Z} \left(\tfrac{3}{2}\right)^{\frac{1}{3}} Z^{\frac{7}{3}} - \tfrac{1}{2}Z^2 + \tfrac{1}{12}\left(\tfrac{2}{3}\right)^{\frac{1}{3}} Z^{\frac{5}{3}} + \cdots$$

を示せ．

11-2b　ν を N の関数として漸近展開した式は，もちろん十分大きい N に対してのみ成り立つ．それにもかかわらず，$N = 2$ (!) として展開で第 3 項までとった結果と実際の値 ν を比較してみよ．同様に $N = 10$ の場合はどうか．

11-3　自由度が n のときの $\mathrm{tr}\,\{f(q,p)\}$ の古典的極限は次の式で与えられる．

$$\int \frac{(\mathrm{d}q)\,(\mathrm{d}p)}{(2\pi\hbar)^n} f(q,p)\,.$$

ここで $f = \big(H(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}) + \zeta\big)\eta\big(-H(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}) - \zeta\big)$ について考える．ここで

$$\mathrm{tr}\,\{f\} = \sum_a (\mathcal{E}_a + \zeta)\eta(-\mathcal{E}_a - \zeta) = E_1$$

である．すると $n = 3$ としてスピンが $\frac{1}{2}$ とすると次のようになる．

$$E_{1,\text{class.}} = 2\int \frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,(\mathrm{d}\boldsymbol{p})}{(2\pi\hbar)^3}\big(H(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}) + \zeta\big)\eta\big(-H(\boldsymbol{r},\boldsymbol{p}) - \zeta\big)\,.$$

$H = \boldsymbol{p}^2/(2m_{\mathrm{el}}) + V(\boldsymbol{r})$ に対して，以下のようになることを示せ．

$$E_{1,\text{class.}} = \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\left(-\frac{1}{15\pi^2}\right)\frac{1}{m_{\mathrm{el}}\hbar^3}\big[2m_{\mathrm{el}}(-V - \zeta)\big]^{\frac{5}{2}} = E_1^{\mathrm{TF}}\,.$$

11-4a　TF の微分方程式の 1 つの解（$x \gg 1$ における漸近解）は次のようになることを示せ．

$$f(x) = \frac{(12)^2}{x^3} = \lambda^3\frac{(12)^2}{(\lambda x)^3}\,.$$

また，もし $f(x)$ が微分方程式の解ならば $\lambda^3 f(\lambda x)$ も解となることを示せ（もちろん境界条件 $f(0) = 1$ は満たされない）．

11-4b　2 個の解の微小差 δf は次の方程式を満たすことを示せ．

$$\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2}\delta f(x) = \frac{3}{2}\left(\frac{f(x)}{x}\right)^{\frac{1}{2}}\delta f(x)\,.$$

$3f + x\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}$ は δf の方程式を満たすことを示せ．どうしてこの形が方程式を満たすことが予想できたのか？

11-5 $f<0$ なら $f^{\frac{1}{2}}=0$ という約束のもとで次の式を示せ.

$$f_1^{\frac{5}{2}}=f_2^{\frac{5}{2}}+\tfrac{5}{2}f_2^{\frac{3}{2}}(f_1-f_2)+\int_{f_2}^{f_1}\mathrm{d}f\,(f_1-f)\tfrac{15}{4}f^{\frac{1}{2}}\ .$$

これを使って, 式(11.2.41)の f の汎関数 S の極値は最小値となることを示せ.

11-6a 式(11.2.60)の変分による評価は TF 関数の原点での傾き B の上限を与える. 下限を求めるために, 以下のように求める関数を書こう.

$$g(x)=\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}f(x)=f'(x)\ .$$

正しい関数 $g(x)$ に対して次の式は $\frac{3}{7}B$ となることを示せ.

$$\overline{S}=-\frac{3}{5}\int_0^{\infty}\mathrm{d}x\,x^{\frac{1}{3}}\left[g'(x)\right]^{\frac{5}{3}}-g(0)-\frac{1}{2}\int_0^{\infty}\mathrm{d}x\,\left[g(x)\right]^2\ .$$

また $\overline{S}$ は, もし $g'(x)\geq 0$ および $g(x\to\infty)=0$ を満たすものに限るなら, 正しい g に対して極値をとることを示せ. そしてこの極値は最大値となることを示せ.

11-6b 例として関数

$$g(x)=-\lambda_1\,\mathrm{e}^{-\lambda_2\sqrt{x}}\quad ただし\quad \lambda_{1,2}>0$$

を仮定し, 最適の λ_1 および λ_2 を求めよ. これより得られた B の下限と, 式(11.2.61)の実際の値を比較せよ.

11-7 問題 11-4a で与えられた漸近形を使って r が大きいところでの TF 近似の失敗について検討せよ.

11-8a 中性原子に対する議論を, $N<Z$ である正の TF イオンに対して適用する. そこでは, $f(x)$ は原子の端 $r_0=aZ^{-\frac{1}{3}}x_0$ において以下の境界条件のもとでの TF の微分方程式にしたがうことを示せ.

$$f(x_0)=0\ ,\qquad -x_0\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}x}(x_0)=1-\frac{N}{Z}\ .$$

もちろん $N=Z$ の場合と同じく $f(0)=1$ である. 中性原子に対する値 $B=1.588$ と比較して, 定性的に $-f'(0)$ についてどんなことが言えるか?

11-8b 次の式を示せ.

$$N=\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,n=Z\int_0^{x_0}\mathrm{d}x\,x^{\frac{1}{2}}\left[f(x)\right]^{\frac{3}{2}}\ .$$

そして微分方程式および境界条件を使って, 最後の項が実際 N であることを示せ.

11-9a　TF 原子でのエネルギーとスケーリング：次の式

$$E_1 = -\frac{1}{15\pi^2}\frac{1}{m_{\rm el}\hbar^3}\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\left[2m_{\rm el}(-V-\zeta)\right]^{\frac{5}{2}}$$

および

$$E_2 = -\frac{1}{8\pi e^2}\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\left[\boldsymbol{\nabla}\left(V+\frac{Ze^2}{r}\right)\right]^2$$

で与えられる $E = E_1 - \zeta N + E_2$ について考察する．そして次の物理的境界条件の式を思い出しておこう．

$$\lim_{r\to 0} rV(r) = -Ze^2 \ .$$

まずスケール変換

$$V(r) \to \lambda V(\lambda r)\ , \quad \zeta \to \lambda\zeta\ , \quad Z \to Z$$

より，次の式を示せ．

$$-\tfrac{1}{2}E_1 - \zeta N + E_2 = 0 \quad \text{つまり} \quad E = \tfrac{3}{2}E_1\ .$$

これとは異なる次の変換

$$V(r) \to \lambda^4 V(\lambda r)\ , \quad \zeta \to \lambda^4\zeta \quad Z \to \lambda^3 Z$$

より，次の式

$$7(E_1+E_2) - 4\zeta N = 3Z\frac{\partial}{\partial Z}E(Z,N)$$

つまり

$$E = \frac{3}{7}\left[Z\frac{\partial}{\partial Z}E(Z,N) - \zeta N\right]$$

を示せ．

11-9b　次の式を示せ．

$$\frac{\partial}{\partial N}E(Z,N) = -\zeta\ .$$

これより以下のようになる．

$$\left(Z\frac{\partial}{\partial Z} + N\frac{\partial}{\partial N}\right)E(Z,N) = \frac{7}{3}E(Z,N)\ .$$

まず初めに，中性の原子 $N = Z$ に対して，上の式より $E(Z,Z) \propto Z^{\frac{7}{3}}$ となることを示せ．また，一般的には以下のようになることを示せ．

$$E(Z,N) = Z^{\frac{7}{3}}\varepsilon\left(\frac{N}{Z}\right)\ .$$

ここで $N = Z$ および $N \ll Z$ の場合に，関数 $\varepsilon(N/Z)$ についてどんなことが言え

るか？

11-10　TF 密度は r が小さいときは $r^{-\frac{3}{2}}$ に比例する．11.3 節で使った方法を用い，強く束縛された電子に対する補正を考慮して，原子核の位置での電子の密度 $n(\boldsymbol{r}=0)$ を導け．ボーア殻が詰まったときの $\boldsymbol{r}=0$ での密度が必要となるが，式(8.3.30) よりどのようにして求められるか？

11-11　次の積分で $\boldsymbol{p}$ および $\boldsymbol{p}'$ は半径 P の球の内部を動く．このとき次の式を示せ．

$$\int(\mathrm{d}\boldsymbol{p})\,(\mathrm{d}\boldsymbol{p}')\,\frac{1}{|\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}'|^2}=(2\pi)^2P^4\ .$$

第 12 章

電磁放射

12.1 ラグランジアン，モード，運動方程式

この章では，10 章で論じた方法を用いた新たな応用として，荷電粒子と相互作用する電磁場の問題に取り組むことにする．粒子の運動がおもに非相対論的である原子物理における応用を目指し，ここでも引き続き 4–11 章で展開した非相対論的な記述を用いることにする．

ラグランジアンは粒子(質量 m_a, 電荷 e_a, 位置 $\boldsymbol{r}_a$, 運動量 $\boldsymbol{p}_a$, 速度 $\boldsymbol{v}_a$)についての和と，場のラグランジアン密度の積分からなり，次のように表される．

$$L = \sum_a \left[\boldsymbol{p}\cdot\left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} - \boldsymbol{v}\right) + \frac{1}{2}m\boldsymbol{v}^2 - e\Phi(\boldsymbol{r},t) + \frac{e}{c}\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)\right]_a + \int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,\frac{1}{4\pi}\left[-\boldsymbol{E}\cdot\left(\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{A} + \boldsymbol{\nabla}\Phi\right) - \boldsymbol{B}\cdot\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A} + \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{B}^2 - \boldsymbol{E}^2\right)\right]. \tag{12.1.1}$$

ここで，対称化された積をとることは了解されているものとする．粒子の項については，1 個の粒子に対する運動方程式を 8.6 節ですでに求めている．この節では場の項について調べよう．電場 $\boldsymbol{E}$，およびこれと時間微分の項で対となっているベクトルポテンシャル $\boldsymbol{A}$ を変分すると，2 つの運動方程式

$$\delta\boldsymbol{E}: \qquad \boldsymbol{E} = -\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{A} - \boldsymbol{\nabla}\Phi\,,$$
$$\delta\boldsymbol{A}: \qquad \boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{B} - \frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{E} = \frac{4\pi}{c}\sum_a e_a\boldsymbol{v}_a\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_a) = \frac{4\pi}{c}\boldsymbol{j} \tag{12.1.2}$$

を得る．ここで $\boldsymbol{j}$ は運動する電荷による電流密度である．一方，磁場 $\boldsymbol{B}$ とスカラーポテンシャル Φ を変分すると，ラグランジアンの中にこれらの量の時間微分が含まれていないから，2 つの拘束条件

$$\delta \boldsymbol{B}: \qquad \boldsymbol{B} = \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{A} ,$$

$$\delta \Phi: \qquad \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{E} = 4\pi \sum_a e_a \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_a) = 4\pi\rho \tag{12.1.3}$$

を得る．ここで ρ は電荷密度である．

これらの拘束条件を用いると，直接に運動方程式では決まらない場 $\boldsymbol{B}$ および Φ を消去することができる．磁場 $\boldsymbol{B}$ は簡単である．定義として $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{A}$ を受け入れればよい．Φ に関しては式(12.1.3)における $\delta\Phi$ の方程式に戻り，$\boldsymbol{E}$ を縦波成分 $\boldsymbol{E}_\parallel$ と横波成分 $\boldsymbol{E}_\perp$ に分解して

$$\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_\parallel + \boldsymbol{E}_\perp \quad \text{ただし} \quad \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{E}_\parallel = 0 \quad \text{および} \quad \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{E}_\perp = 0 \tag{12.1.4}$$

とする．電場の縦波成分を Φ を用いて表すと

$$\boldsymbol{E}_\parallel = -\boldsymbol{\nabla}\Phi \quad \text{であり，確かに} \quad \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{E}_\parallel = 0 \tag{12.1.5}$$

が成り立ち，さらに Φ に対するポアソン方程式とその解

$$-\boldsymbol{\nabla}^2 \Phi = 4\pi\rho , \qquad \Phi(\boldsymbol{r}, t) = \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}') \, \frac{\rho(\boldsymbol{r}', t)}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|} \tag{12.1.6}$$

を得る．

同様に

$$\boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}_\parallel + \boldsymbol{A}_\perp \quad \text{ただし} \quad \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{A}_\parallel = 0 \quad \text{および} \quad \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{A}_\perp = 0 , \tag{12.1.7}$$

となるが，ここでゲージ変換の自由度 $\boldsymbol{A} \to \boldsymbol{A} + \boldsymbol{\nabla}\lambda$ (8.6 節と問題 12-1 を参照)により，縦波成分 $\boldsymbol{A}_\parallel$ は任意であるから，特に 0 となるように選ぶことができる．そこで

$$\boldsymbol{A}_\parallel = 0 , \quad \boldsymbol{A} = \boldsymbol{A}_\perp , \qquad \boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{A} = 0 \tag{12.1.8}$$

とする．これは 放射ゲージと呼ばれ，ゲージ不変な横波成分 $\boldsymbol{A}$ のみを考えることになる．ちなみに，式(12.1.2)にある $\boldsymbol{E}$ の方程式と式(12.1.5)が両立するためには，$\partial \boldsymbol{A}_\parallel / \partial t = 0$ が要求されることがわかる．

ここで，以下のことに注意しよう．放射ゲージでは時間微分の項は

$$\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}) \, \frac{1}{4\pi} \left[-\boldsymbol{E} \cdot \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{A} \right] = \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}) \, \frac{1}{4\pi} \left[-\boldsymbol{E}_\perp \cdot \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} \boldsymbol{A} \right] \tag{12.1.9}$$

と横波成分のみを含むが，これは $\boldsymbol{E}_\parallel$ の寄与が部分積分により取り去られることによる．さらに，$\boldsymbol{E}^2$ の積分は 2 つに分離して

$$\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}) \, \frac{\boldsymbol{E}^2}{8\pi} = \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}) \, \frac{\boldsymbol{E}_\perp^2}{8\pi} + \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}) \, \frac{\boldsymbol{E}_\parallel^2}{8\pi} \tag{12.1.10}$$

となり，この縦波成分の寄与は電荷の静電的相互作用エネルギーであることが以下のように示される．

$$\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}) \frac{\boldsymbol{E}_\parallel^2}{8\pi} = \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}) \frac{(\boldsymbol{\nabla}\Phi)^2}{8\pi} = \frac{1}{2}\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\, \rho\Phi$$
$$= \frac{1}{2}\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})(\mathrm{d}\boldsymbol{r}') \frac{\rho(\boldsymbol{r},t)\rho(\boldsymbol{r}',t)}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} = \frac{1}{2}\sum_{a,b} \frac{e_a e_b}{|\boldsymbol{r}_a - \boldsymbol{r}_b|} \,. \tag{12.1.11}$$

ここで $a = b$ の項は和に含まない．さらにラグランジアン(12.1.1)に現れるクーロンポテンシャルの項は

$$\sum_a \big[e\Phi(\boldsymbol{r},t)\big]_a = \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\, \rho\Phi = \sum_{a,b} \frac{e_a e_b}{|\boldsymbol{r}_a - \boldsymbol{r}_b|} \tag{12.1.12}$$

となり，静電的相互作用エネルギーの 2 倍である．

以上より次のラグランジアンに到達した．

$$L = \sum_a \left[\boldsymbol{p}\cdot\left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} - \boldsymbol{v}\right) + \frac{1}{2}m\boldsymbol{v}^2 + \frac{e}{c}\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)\right]_a - \frac{1}{2}\sum_{a\neq b} \frac{e_a e_b}{|\boldsymbol{r}_a - \boldsymbol{r}_b|}$$
$$+ \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}) \left[-\frac{1}{4\pi c}\boldsymbol{E}_\perp \cdot \frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{A} - \frac{(\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A})^2 + \boldsymbol{E}_\perp^2}{8\pi}\right] \,. \tag{12.1.13}$$

このラグランジアンは，粒子のみが関与する項

$$L_{\text{part.}} = \sum_a \left[\boldsymbol{p}\cdot\left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} - \boldsymbol{v}\right) + \frac{1}{2}m\boldsymbol{v}^2\right]_a - \frac{1}{2}\sum_{a\neq b} \frac{e_a e_b}{|\boldsymbol{r}_a - \boldsymbol{r}_b|} \tag{12.1.14}$$

と放射場のみが関与する項

$$L_{\text{field}} = \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}) \left[-\frac{1}{4\pi c}\boldsymbol{E}_\perp \cdot \frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{A} - \frac{(\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A})^2 + \boldsymbol{E}_\perp^2}{8\pi}\right] \tag{12.1.15}$$

に加えて，相互作用項

$$L_{\text{int.}} = \sum_a \frac{e_a}{c}\boldsymbol{v}_a(t)\cdot\boldsymbol{A}\big(\boldsymbol{r}_a(t),t\big) = \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}) \frac{1}{c}\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) \tag{12.1.16}$$

から成り立っている．相互作用ラグランジアン $L_{\text{int.}}$ を記述するこの等価な 2 つの方法は，それぞれ粒子および放射場を強調している．

ここで，ストークス*の定理と $\boldsymbol{A}$ の横波的性質によって，不等式

$$0 < \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\, \big(\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A}\big)^2 = \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\, \big[\boldsymbol{A}\cdot\big(\boldsymbol{\nabla}\times(\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A})\big)\big]$$
$$= \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\, \boldsymbol{A}\cdot\big(-\boldsymbol{\nabla}^2\big)\boldsymbol{A} \tag{12.1.17}$$

が成り立つから，負のラプラシアン $-\boldsymbol{\nabla}^2$ は正の微分演算子であることに注意しよう．

---

*Sir George Gabriel Stokes (1819–1903)

$-\boldsymbol{\nabla}^2$ に対する横波の固有ベクトル関数を導入すると便利である．このベクトル関数は次の 2 つの方程式

$$-\boldsymbol{\nabla}^2 \boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r}) = \left(\frac{\omega_\alpha}{c}\right)^2 \boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r}) \,, \qquad \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r}) = 0 \tag{12.1.18}$$

を満たし（慣用により $\omega_\alpha > 0$ である），横波の関数として完全系を成し（詳細は問題 12-3 を参照），正規直交性

$$\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\, \boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r})^* \cdot \boldsymbol{A}_\beta(\boldsymbol{r}) = \delta_{\alpha\beta} \tag{12.1.19}$$

を満足する．もう 1 つの重要な性質は，もし $\omega_\alpha \neq \omega_\beta$ ならば

$$\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\, \boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r}) \cdot \boldsymbol{A}_\beta(\boldsymbol{r}) = 0 \tag{12.1.20}$$

が成り立つことである．これは $\boldsymbol{A}_\alpha^*$ が $\boldsymbol{A}_\alpha$ と同じ ω に対して式(12.1.18)にしたがうからである．

放射場の無限に多くの自由度を扱うために，これらのモード関数を用いて横波の場 $\boldsymbol{E}_\perp$ および $\boldsymbol{A}$ をエルミート演算子として表すと

$$\begin{aligned}\frac{1}{c}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) &= \sum_\alpha \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_\alpha}} \left(y_\alpha(t)\boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r}) + y_\alpha(t)^\dagger \boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r})^* \right) , \\ \boldsymbol{E}_\perp(\boldsymbol{r},t) &= \sum_\alpha \sqrt{2\pi\hbar\omega_\alpha} \left(\mathrm{i}y_\alpha(t)\boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r}) - \mathrm{i}y_\alpha(t)^\dagger \boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r})^* \right)\end{aligned} \tag{12.1.21}$$

となる．これより，付加的な時間微分の項を無視すると以下のような置き換えをすることができる．

$$\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}) \left(-\frac{1}{4\pi c}\right) \boldsymbol{E}_\perp \cdot \frac{\partial}{\partial t}\boldsymbol{A} \longrightarrow \sum_\alpha \mathrm{i}\hbar y_\alpha^\dagger \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} y_\alpha \,. \tag{12.1.22}$$

同様に付加的な定数を無視すると

$$\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\, \frac{(\boldsymbol{\nabla}\times\boldsymbol{A})^2 + \boldsymbol{E}_\perp^2}{8\pi} \longrightarrow \sum_\alpha \hbar\omega_\alpha y_\alpha^\dagger y_\alpha \tag{12.1.23}$$

と置き換えることができる．以上まとめると次のラグランジアンに到達する．

$$\begin{aligned}L = &\sum_a \left[\boldsymbol{p}\cdot\left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} - \boldsymbol{v}\right) + \frac{1}{2}m\boldsymbol{v}^2 + e\boldsymbol{v}\cdot\sum_\alpha \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_\alpha}} \left(y_\alpha \boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r}) + y_\alpha^\dagger \boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r})^* \right) \right]_a \\ &- \frac{1}{2}\sum_{a\neq b} \frac{e_a e_b}{|\boldsymbol{r}_a - \boldsymbol{r}_b|} + \underbrace{\sum_\alpha \left[\mathrm{i}\hbar y_\alpha^\dagger \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} y_\alpha - \hbar\omega_\alpha y_\alpha^\dagger y_\alpha \right]}_{=L_{\text{field.}}} \,.\end{aligned} \tag{12.1.24}$$

このラグランジアンの構造から，交換関係と運動方程式を読み取ることができる．異なる自由度に関する演算子はもちろん交換し，また各自由度内で 0 とならないものは

$$\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[r_k, p_k\right] = 1 \,, \qquad \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\left[y, \mathrm{i}\hbar y^\dagger\right] = \left[y, y^\dagger\right] = 1 \tag{12.1.25}$$

だけである．$y_\alpha^\dagger$ で変分すると y_α の運動方程式

$$\left(\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}-\omega_\alpha\right)y_\alpha=-\sqrt{\frac{2\pi}{\hbar\omega_\alpha}}\sum_a e_a\boldsymbol{v}_a\cdot\boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r}_a)^* \tag{12.1.26}$$

が得られ，y_α で変分すると $y_\alpha^\dagger$ の運動方程式

$$\left(-\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}-\omega_\alpha\right)y_\alpha^\dagger=-\sqrt{\frac{2\pi}{\hbar\omega_\alpha}}\sum_a e_a\boldsymbol{v}_a\cdot\boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r}_a) \tag{12.1.27}$$

が得られる．電流の成分を次のように

$$j_\alpha(t)=\sum_a e_a\boldsymbol{v}_a(t)\cdot\boldsymbol{A}_\alpha\big(\boldsymbol{r}_a(t)\big)^*=\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)\cdot\boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r})^*\ ,$$

$$j_\alpha(t)^\dagger=\sum_a e_a\boldsymbol{v}_a(t)\cdot\boldsymbol{A}_\alpha\big(\boldsymbol{r}_a(t)\big)=\int(\mathrm{d}\boldsymbol{r})\,\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r},t)\cdot\boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r}) \tag{12.1.28}$$

として導入すると（必要ならば積は対称化することを思い起こすこと），相互作用ラグランジアンは簡潔に

$$L_{\mathrm{int.}}=\sum_\alpha\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_\alpha}}\left(\boldsymbol{j}_\alpha^\dagger y_\alpha+y_\alpha^\dagger\boldsymbol{j}_\alpha\right) \tag{12.1.29}$$

と表され，運動方程式は

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_\alpha t}y_\alpha(t)\right)=\mathrm{i}\sqrt{\frac{2\pi}{\hbar\omega_\alpha}}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_\alpha t}j_\alpha(t)\ ,$$

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha t}y_\alpha(t)^\dagger\right)=-\mathrm{i}\sqrt{\frac{2\pi}{\hbar\omega_\alpha}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha t}j_\alpha(t)^\dagger \tag{12.1.30}$$

となる．これより，電磁的モードは荷電粒子が作る電流によって駆動された振動子として記述されることがわかる．

12.2 有効作用

電荷は存在せず，したがって放射場は駆動されないという状況をまず考えよう．すると放射場は独立な振動子の集合であり，10.8 節の結果から時間変換関数は

$$\left\langle y^{\dagger\prime},t_1\middle|y'',t_2\right\rangle=\prod_\alpha\underbrace{\left\langle y_\alpha^{\dagger\prime},t_1\middle|y_\alpha'',t_2\right\rangle}_{=\,\mathrm{e}^{y_\alpha^{\dagger\prime}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha(t_1-t_2)}y_\alpha''}}$$

$$=\sum_{\{n\}}\left\langle y^{\dagger\prime}\middle|\{n\}\right\rangle\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}E(\{n\})(t_1-t_2)}\left\langle\{n\}\middle|y''\right\rangle \tag{12.2.1}$$

であることがわかっている．ここで $\left|\{n\}\right\rangle$ は各モード α に n_α 個の光量子 – 光子 –が存在する状態を記述するベクトルであり，この多光子状態のエネルギーは

$$E(\{n\}) = \sum_\alpha \hbar\omega_\alpha n_\alpha \tag{12.2.2}$$

となり，多光子波動関数は

$$\langle y^{\dagger\prime}|\{n\}\rangle = \prod_\alpha \frac{\left(y_\alpha^{\dagger\prime}\right)^{n_\alpha}}{\sqrt{n_\alpha!}}, \qquad \langle\{n\}|y''\rangle = \prod_\alpha \frac{(y''_\alpha)^{n_\alpha}}{\sqrt{n_\alpha!}} \tag{12.2.3}$$

で表される．

荷電粒子が存在する場合の時間変換関数

$$\langle y^{\dagger\prime},\ldots,t_1|y'',\ldots,t_2\rangle \equiv \langle 1|2\rangle \tag{12.2.4}$$

を調べることにする．ここで省略記号$(\ldots)$は粒子の記述についての何らかの選択を表している．ラグランジアンの構造が

$$L = L_{\text{part.}} + L_{\text{int.}} + L_{\text{field}} \tag{12.2.5}$$

であることに留意して，まず粒子変数のみを変分する．この変数は $L_{\text{part.}}$ および $L_{\text{int.}}$ に現れるので

$$\delta_{\text{part.}}\langle 1|2\rangle = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle 1|\delta_{\text{part.}}\left[\int_2^1 \mathrm{d}t\left(L_{\text{part.}} + L_{\text{int.}}\right)\right]|2\rangle \tag{12.2.6}$$

となり，特に

$$\delta_{\text{part.}} L_{\text{int.}} = \sum_\alpha \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_\alpha}}\left[\delta_{\text{part.}}\boldsymbol{j}_\alpha^\dagger\, y_\alpha + y_\alpha^\dagger\, \delta_{\text{part.}}\boldsymbol{j}_\alpha\right] \tag{12.2.7}$$

である．ここで，強制振動子の運動方程式(12.1.30)の解は(式(7.2.9)と(7.2.10)を比較せよ)

$$\begin{aligned} y_\alpha(t) &= \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha(t-t_2)}y_\alpha(t_2) + \mathrm{i}\sqrt{\frac{2\pi}{\hbar\omega_\alpha}}\int_2^1 \mathrm{d}t'\,\eta(t-t')\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha(t-t')}j_\alpha(t'), \\ y_\alpha(t)^\dagger &= y_\alpha(t_1)^\dagger\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha(t_1-t)} + \mathrm{i}\sqrt{\frac{2\pi}{\hbar\omega_\alpha}}\int_2^1 \mathrm{d}t'\,j_\alpha(t')^\dagger\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha(t'-t)}\eta(t'-t) \end{aligned} \tag{12.2.8}$$

である．y_α の初期条件 $y_\alpha(t_2) \to y''_\alpha$ と，$y_\alpha^\dagger$ の終期条件 $y_\alpha(t_1)^\dagger \to y_\alpha^{\dagger\prime}$ の結果として，作用変分 $\delta_{\text{part.}}\int_2^1 \mathrm{d}t\,L_{\text{int.}}$ の一部は

$$\begin{aligned} &\int_2^1 \mathrm{d}t\sum_\alpha\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_\alpha}}\Big[\delta_{\text{part.}}j_\alpha(t)^\dagger\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha(t-t_2)}y''_\alpha \\ &\qquad\qquad + y_\alpha^{\dagger\prime}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha(t_1-t)}\delta_{\text{part.}}j_\alpha(t)\Big] \\ &= \delta_{\text{part.}}\left[\int_2^1 \mathrm{d}t\sum_a \frac{e_a}{c}\boldsymbol{v}_a\cdot\boldsymbol{A}'\big(\boldsymbol{r}_a(t),t\big)\right] \end{aligned} \tag{12.2.9}$$

となる．ここで，

$$\frac{1}{c}\boldsymbol{A}'(\boldsymbol{r},t) = \sum_\alpha \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_\alpha}}\left[\boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r})\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha(t-t_2)}y''_\alpha + y^{\dagger\,\prime}_\alpha\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha(t_1-t)}\boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r})^*\right] \tag{12.2.10}$$

とした．さらに，$\delta_{\mathrm{part.}}\int_2^1 \mathrm{d}t\, L_{\mathrm{int.}}$ の第 2 の部分は

$$\int_2^1 \mathrm{d}t\,\mathrm{d}t'\,\mathrm{i}\sum_\alpha \frac{2\pi}{\omega_\alpha}\left[\delta_{\mathrm{part.}}j_\alpha(t)^\dagger\eta(t-t')\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha(t-t')}j_\alpha(t)\right.$$
$$\left. + j_\alpha(t)^\dagger\eta(t-t')\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha(t-t')}\delta_{\mathrm{part.}}j_\alpha(t)\right]$$
$$= \delta_{\mathrm{part.}}\left[\int_2^1 \mathrm{d}t\,\mathrm{d}t'\,\mathrm{i}\sum_\alpha \frac{2\pi}{\omega_\alpha}j_\alpha(t)^\dagger\eta(t-t')\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha(t-t')}j_\alpha(t')\right] \tag{12.2.11}$$

である．

したがって，与えられた有効場 $\boldsymbol{A}'(\boldsymbol{r},t)$ に対して，有効粒子作用

$$W_{12}^{\boldsymbol{A}'} = \int_2^1 \mathrm{d}t\left[L_{\mathrm{part.}} + \sum_a \frac{e_a}{c}\boldsymbol{v}_a\cdot\boldsymbol{A}'\big(\boldsymbol{r}_a(t),t\big)\right]$$
$$+ \int_2^1 \mathrm{d}t\,\mathrm{d}t'\,\mathrm{i}\sum_\alpha \frac{2\pi}{\omega_\alpha}j_\alpha(t)^\dagger\eta(t-t')\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha(t-t')}j_\alpha(t') \tag{12.2.12}$$

を得る．これは $\boldsymbol{A}'$（すなわち y''_α および $y^{\dagger\,\prime}_\alpha$）を固定した場合の時間変換関数の粒子部分

$$\delta\big\langle\ldots,t_1\big|\ldots,t_2\big\rangle^{\boldsymbol{A}'} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\big\langle\ldots,t_1\big|\delta W_{12}^{\boldsymbol{A}'}\big|\ldots,t_2\big\rangle \tag{12.2.13}$$

を決定する．完全な時間変換関数はちょうど

$$\big\langle y^{\dagger\,\prime},\ldots,t_1\big|y'',\ldots,t_2\big\rangle = \underbrace{\big\langle y^{\dagger\,\prime},t_1\big|y'',t_2\big\rangle}_{\text{光子のみ}}\ \underbrace{\big\langle\ldots,t_1\big|\ldots,t_2\big\rangle^{\boldsymbol{A}'}}_{\text{光子の影響下での粒子}} \tag{12.2.14}$$

で与えられる．

12.3 無矛盾性の検証

もちろん，前節の結果が光子に対する荷電粒子の効果も正しく含んでいることを検証しなければならない．そこで，

$$\frac{\partial}{\partial y_\alpha^{\dagger\prime}}\langle 1|2\rangle = \langle 1|y_\alpha(t_1)|2\rangle$$

$$= \langle 1|\Big[\mathrm{e}^{-i\omega_\alpha(t_1-t_2)}\ \underset{\displaystyle y''_\alpha}{\underset{\downarrow}{y_\alpha(t_2)}}\ + \mathrm{i}\sqrt{\frac{2\pi}{\hbar\omega_\alpha}}\int_2^1 \mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha(t_1-t)} j_\alpha(t)\Big]|2\rangle$$

$$= \mathrm{e}^{-i\omega_\alpha(t_1-t_2)} y''_\alpha\langle 1|2\rangle + \mathrm{i}\sqrt{\frac{2\pi}{\hbar\omega_\alpha}}\int_2^1 \mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha(t_1-t)}\langle 1|j_\alpha(t)|2\rangle \qquad (12.3.1)$$

と表されることを考慮して，この式と次の式を比較しよう．

$$\frac{\partial}{\partial y_\alpha^{\dagger\prime}}\Big[\langle y^{\dagger\prime},t_1|y'',t_2\rangle\langle\ldots,t_1|\ldots,t_2\rangle^{\boldsymbol{A}'}\Big]$$

$$= \left(\frac{\partial}{\partial y_\alpha^{\dagger\prime}}\langle y^{\dagger\prime},t_1|y'',t_2\rangle\right)\langle\ldots,t_1|\ldots,t_2\rangle^{\boldsymbol{A}'}$$

$$+ \langle y^{\dagger\prime},t_1|y'',t_2\rangle\frac{\partial}{\partial y_\alpha^{\dagger\prime}}\langle\ldots,t_1|\ldots,t_2\rangle^{\boldsymbol{A}'}\ . \qquad (12.3.2)$$

最初の部分に関しては，

$$\frac{\partial}{\partial y_\alpha^{\dagger\prime}}\langle y^{\dagger\prime},t_1|y'',t_2\rangle = \frac{\partial}{\partial y_\alpha^{\dagger\prime}}\ \mathrm{e}^{\sum_\beta y_\beta^{\dagger\prime}\,\mathrm{e}^{-i\omega_\beta(t_1-t_2)} y''_\beta}$$

$$= \mathrm{e}^{-i\omega_\alpha(t_1-t_2)} y''_\alpha\langle y^{\dagger\prime},t_1|y'',t_2\rangle \qquad (12.3.3)$$

を得る．2 番目の部分については作用原理を用いて，特に $y_\alpha^{\dagger\prime}$ の無限小変化によって $\boldsymbol{A}'(\boldsymbol{r},t)$ を変分すると

$$\delta_{\boldsymbol{A}'}\langle\ldots,t_1|\ldots,t_2\rangle^{\boldsymbol{A}'} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle\ldots,t_1|\int_2^1 \mathrm{d}t\sum_a\frac{e_a}{c}\boldsymbol{v}_a\cdot\delta\boldsymbol{A}'\big(\boldsymbol{r}_a(t),t\big)|\ldots,t_2\rangle^{\boldsymbol{A}'} \qquad (12.3.4)$$

となる．ここで当面の目的のために

$$\frac{1}{c}\delta\boldsymbol{A}' = \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_\alpha}}\,\delta y_\alpha^{\dagger\prime}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha(t_1-t)}\boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r})^* \qquad (12.3.5)$$

とおく．したがって，

$$\frac{\partial}{\partial y_\alpha^{\dagger\prime}}\langle\ldots,t_1|\ldots,t_2\rangle^{\boldsymbol{A}'}$$

$$= \mathrm{i}\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_\alpha}}\int_2^1 \mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha(t_1-t)}\langle\ldots,t_1|j_\alpha(t)|\ldots,t_2\rangle^{\boldsymbol{A}'} \qquad (12.3.6)$$

となり，明らかに粒子行列要素が

$$\langle 1|j_\alpha(t)|2\rangle = \langle y^{\dagger\prime},t_1|y'',t_2\rangle\langle\ldots,t_1|j_\alpha(t)|\ldots,t_2\rangle^{\boldsymbol{A}'} \qquad (12.3.7)$$

と矛盾なく解釈できるから，この2つの見方は同じであることがわかる．

これまでは粒子変数と光子変数の変分を行った．しかし時間 t_1 と t_2 についてはどのようになるだろうか？ 例として，時間 t_1 のシュレーディンガー方程式

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\partial}{\partial t_1}\langle 1|2\rangle = \langle 1|H|2\rangle \tag{12.3.8}$$

を考えよう．これは厳密に式

$$\frac{\partial\langle y^{\dagger\prime}, t_1|y'', t_2\rangle}{\partial t_1}\langle\ldots, t_1|\ldots, t_2\rangle^{\boldsymbol{A}'} + \langle y^{\dagger\prime}, t_1|y'', t_2\rangle\frac{\partial\langle\ldots, t_1|\ldots, t_2\rangle^{\boldsymbol{A}'}}{\partial t_1} \tag{12.3.9}$$

によって作り出されるであろうか？

ここでラグランジアンの見方を採用すると，この導出が簡単になる．速度は

$$\boldsymbol{v}_a = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_a}{\mathrm{d}t} \tag{12.3.10}$$

であるから，粒子部分は

$$\mathrm{d}t\, L_{\text{part.}} = \sum_a \frac{m_a}{2}\frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{r}_a)^2}{\mathrm{d}t} - \mathrm{d}t\,\frac{1}{2}\sum_{a\neq b}\frac{e_a e_b}{|\boldsymbol{r}_a - \boldsymbol{r}_b|} \tag{12.3.11}$$

となり，相互作用部分は(式(12.1.28)での j_α の定義を思い起こすと)，

$$\mathrm{d}t\, L_{\text{int.}} = \sum_\alpha \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_\alpha}}\sum_a \left[y_\alpha e_a \mathrm{d}\boldsymbol{r}_a\cdot\boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r}_a) + y_\alpha^\dagger e_a\mathrm{d}\boldsymbol{r}_a\cdot\boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r}_a)^*\right] \tag{12.3.12}$$

であり，さらに場の部分は

$$\mathrm{d}t\, L_{\text{field}} = \sum_\alpha\left[\mathrm{i}\hbar y_\alpha^\dagger\,\mathrm{d}y_\alpha - \mathrm{d}t\,\hbar\omega_\alpha y_\alpha^\dagger y_\alpha\right] \tag{12.3.13}$$

である．そして H を $\delta[\mathrm{d}t\, L]$ における $-\mathrm{d}\delta t$ の係数であると同定する．このようにしてハミルトニアンが

$$H = \underbrace{\sum_a\frac{m_a}{2}\left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}_a}{\mathrm{d}t}\right)^2 + \frac{1}{2}\sum_{a\neq b}\frac{e_a e_b}{|\boldsymbol{r}_a - \boldsymbol{r}_b|}}_{=H_{\text{part.}}} + \sum_\alpha \hbar\omega_\alpha y_\alpha^\dagger y_\alpha \tag{12.3.14}$$

であることを知る．

これより，時間 t_1 のシュレーディンガー方程式はもっと具体的に

$$\begin{aligned}&\frac{\partial}{\partial t_1}\langle y^{\dagger\prime}, \ldots, t_1|y'', \ldots, t_2\rangle\\ &\qquad = -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle y^{\dagger\prime}, \ldots, t_1|\Big[H_{\text{part.}} + \sum_\alpha \hbar\omega_\alpha y_\alpha(t_1)^\dagger y_\alpha(t_1)\Big]|y'', \ldots, t_2\rangle\end{aligned} \tag{12.3.15}$$

と表される．ここで $y, y^\dagger$ の固有値を導入することができるから，

$$y_\alpha(t_1)^\dagger \to y_\alpha^{\dagger\prime}, \qquad y_\alpha(t_1) \to \mathrm{e}^{-i\omega_\alpha(t_1-t_2)} y_\alpha'' + \mathrm{i}\sqrt{\frac{2\pi}{\hbar\omega_\alpha}} \int_2^1 \mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha(t_1-t)} j_\alpha(t) \tag{12.3.16}$$

と置き換えることができ，これより純粋な光子部分

$$-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\sum_\alpha \hbar\omega_\alpha y_\alpha^{\dagger\prime}\,\mathrm{e}^{-i\omega_\alpha(t_1-t_2)} y_\alpha''\langle 1|2\rangle \tag{12.3.17}$$

は，

$$\langle y^{\dagger\prime}, t_1 | y'', t_2\rangle = \mathrm{e}^{\sum_\alpha y_\alpha^{\dagger\prime}\,\mathrm{e}^{-i\omega_\alpha(t_1-t_2)} y_\alpha''} \tag{12.3.18}$$

の t_1 微分で現れる項にちょうど同じであることが直ちに理解できる．残された唯一の疑問は，行列要素

$$-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle y^{\dagger\prime}, \dots, t_1\Big|\Big[H_{\text{part.}} + \mathrm{i}\sum_\alpha \sqrt{2\pi\hbar\omega_\alpha}\, y_\alpha^{\dagger\prime}\int_2^1 \mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha(t_1-t)} j_\alpha(t)\Big]\Big|y'', \dots, t_2\rangle \tag{12.3.19}$$

が，

$$\langle y^{\dagger\prime}, t_1 | y'', t_2\rangle \frac{\partial}{\partial t_1}\langle \dots, t_1 | \dots, t_2\rangle^{\boldsymbol{A}'} \tag{12.3.20}$$

に等しいかどうかである．これはまた以下の疑問と同じである．粒子関数 $\langle \dots, t_1 | \dots, t_2\rangle^{\boldsymbol{A}'}$ に結び付いた時間 t_1 のハミルトニアンは

$$H_1^{\boldsymbol{A}'} = H_{\text{part.}} + \mathrm{i}\sum_\alpha \sqrt{2\pi\hbar\omega_\alpha}\, y_\alpha^{\dagger\prime}\int_2^1 \mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha(t_1-t)} j_\alpha(t) \tag{12.3.21}$$

で与えられるであろうか？

この疑問に答えるために，式(12.2.12)の有効作用 $W_{12}^{\boldsymbol{A}'}$ を振り返って眺めよう．そこでは，

$$\mathrm{d}t\sum_a \frac{e_a}{c}\boldsymbol{v}_a\cdot\boldsymbol{A}' = \sum_a e_a\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}_a \sum_\alpha \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_\alpha}}\Big[\boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r}_a)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha(t-t_2)} y_\alpha'' + y_\alpha^{\dagger\prime}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha(t_1-t)}\boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r}_a)^*\Big] \tag{12.3.22}$$

であり，例として

$$\mathrm{d}t\, j_\alpha^\dagger = \sum_a e_a\,\mathrm{d}\boldsymbol{r}_a\cdot\boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r}_a) \tag{12.3.23}$$

である．まず最初に，$W_{12}^{\boldsymbol{A}'}$ における $j^\dagger\cdots j$ 項の t 変分は δt に陽に依存しているが $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\delta t$ の依存性はなく，$H_1^{\boldsymbol{A}'}$ への寄与は現れないことに注意しよう．もちろん $L_{\text{part.}}$ は

従来通り $H_{\mathrm{part.}}$ を与える．残りは式(12.3.22)の項だけである．ここでは再び，δt 依存性はあるが $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\delta t$ の依存性はない．これは問題であると思うかもしれないが，大丈夫である．実際，有効場 $\boldsymbol{A}'$ が終時間 t_1 に陽に依存する．$W_{12}^{\boldsymbol{A}'}$ の関連する項は

$$\int \mathrm{d}t \sum_a e_a \boldsymbol{v}_a \cdot \sum_\alpha \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_\alpha}}(-\mathrm{i}\omega_\alpha \delta t_1) y_\alpha^{\dagger\,\prime}\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha(t_1 - t)} \boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r}_a)^*$$

$$= -\,\delta t_1 \left[\mathrm{i}\sum_\alpha \sqrt{2\pi\hbar\omega_\alpha}\, y_\alpha^{\dagger\,\prime} \int_2^1 \mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha(t_1 - t)} j_\alpha(t)\right] \tag{12.3.24}$$

であり，$H_1^{\boldsymbol{A}'}$ にちょうど必要とする寄与である．

12.4 自由空間の光子モード関数

無限の空間の場合に対する光子モード関数 $\boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r})$ について，もっと具体的に考えることにしよう．この場合には，式(12.1.18)や(12.1.19)で述べられた定義的な性質に加えて特に満たすべき境界条件は存在しない．基本解は平面波

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \quad ただし \quad |\boldsymbol{k}| = \frac{\omega}{c} \tag{12.4.1}$$

であり，この関数に横波のベクトルの性質を付与するために偏光ベクトル $\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}$ を掛ける．このベクトルは，たとえば線形偏光に対しては $\lambda = 1, 2$，円偏光に対しては $\lambda = \pm$ とし，さらに条件

$$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda} = 0 \quad および \quad \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}{}^* \cdot \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda'} = \delta_{\lambda,\lambda'} \tag{12.4.2}$$

にしたがう．そして小さな波数のセルに関して規格化し

$$\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}\lambda}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda} \frac{1}{\sqrt{(2\pi)^3\,(\delta\boldsymbol{k})}} \int_{(\delta\boldsymbol{k})} (\mathrm{d}\boldsymbol{k})\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{12.4.3}$$

と表す．すると，

$$\int_{(\delta\boldsymbol{k})} (\mathrm{d}\boldsymbol{k}) \int_{(\delta\boldsymbol{k}')} (\mathrm{d}\boldsymbol{k}') \underbrace{\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}}}_{=(2\pi)^3\delta(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')} = (2\pi)^3\,(\delta\boldsymbol{k})\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} \tag{12.4.4}$$

を考慮すると，モード関数の正規直交性は簡単に次のように簡単に証明できる．

$$\begin{aligned}\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\, \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}\lambda}(\boldsymbol{r})^* \cdot \boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}'\lambda'}(\boldsymbol{r}) &= \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}^* \cdot \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}'\lambda'} \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{1}{\sqrt{(\delta\boldsymbol{k})\,(\delta\boldsymbol{k}')}} \\ &\quad \times \int_{(\delta\boldsymbol{k})} (\mathrm{d}\boldsymbol{k}) \int_{(\delta\boldsymbol{k}')} (\mathrm{d}\boldsymbol{k}') \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\cdot\boldsymbol{r}} \\ &= \delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\delta_{\lambda,\lambda'}\,.\end{aligned} \tag{12.4.5}$$

$\Delta \boldsymbol{k}$ を $(\delta \boldsymbol{k})$ セルの大きさを測る量とし，$\boldsymbol{r}$ の範囲が

$$|\Delta \boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{r}| \ll 1 \tag{12.4.6}$$

と制限されている限りでは，$(\delta \boldsymbol{k})$ よりむしろ $(\mathrm{d}\boldsymbol{k})$ を用いて

$$\boldsymbol{A}_{\boldsymbol{k}\lambda}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}\sqrt{\frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k})}{(2\pi)^3}}\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{12.4.7}$$

と書けば十分である．もちろんこれはスカラーモード関数(10.8.12)をちょうど横波のベクトルへ拡張したものである．

このように選ぶことで，$(\omega = c|\boldsymbol{k}|)$

$$\frac{1}{c}\boldsymbol{A}'(\boldsymbol{r},t) = \sum_{\boldsymbol{k},\lambda}\frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{\hbar(\mathrm{d}\boldsymbol{k})}{\omega}}\Big[\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}[\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega(t-t_2)]}y''_{\boldsymbol{k}\lambda} + \boldsymbol{e}^*_{\boldsymbol{k}\lambda}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}[\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega(t-t_1)]}y^{\dagger\prime}_{\boldsymbol{k}\lambda}\Big] \tag{12.4.8}$$

を得る．ここで具体的な t_1, t_2 依存性を対応する固有値に結び付けて，

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}[\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t]}y''_{\boldsymbol{k}\lambda}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t_2}\ ; \qquad \mathrm{e}^{-\mathrm{i}[\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}-\omega t]}y^{\dagger\prime}_{\boldsymbol{k}\lambda}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t_1} \tag{12.4.9}$$

と表す方がわかりやすいかもしれない．

時間について非局所的な相互作用項

$$W_{12,\text{n-loc}} \equiv \int_2^1 \mathrm{d}t\,\mathrm{d}t'\,\mathrm{i}\sum_\alpha \frac{2\pi}{\omega_\alpha}j_\alpha(t)^\dagger \eta(t-t')\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha(t-t')}j_\alpha(t') \tag{12.4.10}$$

については，

$$\begin{aligned} j_\alpha(t)^\dagger &\to \sum_a e_a\boldsymbol{v}_a(t)\cdot\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}\sqrt{\frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k})}{(2\pi)^3}}\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_a(t)}\ , \\ j_\alpha(t') &\to \sum_b e_b\boldsymbol{v}_b(t')\cdot\boldsymbol{e}^*_{\boldsymbol{k}\lambda}\sqrt{\frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k})}{(2\pi)^3}}\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_b(t')} \end{aligned} \tag{12.4.11}$$

を代入すると次式を得る．

$$\begin{aligned} W_{12,\text{n-loc}} = \int_2^1 \mathrm{d}t\,\mathrm{d}t' \sum_\lambda \int \frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k})}{(2\pi)^2\omega}\Big(\sum_a e_a\boldsymbol{v}_a(t)\cdot\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_a(t)}\Big) \\ \times\,\mathrm{i}\eta(t-t')\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')}\Big(\sum_b e_b\boldsymbol{v}_b(t')\cdot\boldsymbol{e}^*_{\boldsymbol{k}\lambda}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_b(t')}\Big)\ . \end{aligned} \tag{12.4.12}$$

12.5 物理的質量

最初の応用として，初期に光子は存在しない($y''=0$) とし，そして最後にも光子は存在しない($y^{\dagger\prime}=0$) という状況を設定する．すると有効場は $\boldsymbol{A}'(\boldsymbol{r},t)=0$ とな

る．さらに1つの粒子(質量 m_0，電荷 e，位置 $\boldsymbol{r}$，運動量 $\boldsymbol{p}$，速度 $\boldsymbol{v}$)だけを考えることにしよう．すると有効作用は

$$W_{12} \to \int_2^1 \mathrm{d}t \left[\boldsymbol{p}\cdot\left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} - \boldsymbol{v}\right) - \frac{1}{2}m_0\boldsymbol{v}^2\right] + \int_2^1 \mathrm{d}t\,\mathrm{d}t'\,e^2 \sum_\lambda \int \frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k})}{(2\pi)^2\omega}\boldsymbol{v}(t)\cdot\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}(t)} \times \mathrm{i}\eta(t-t')\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')}\boldsymbol{v}(t')\cdot\boldsymbol{e}^*_{\boldsymbol{k}\lambda}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}(t')} \tag{12.5.1}$$

となる．ただし，この時間について非局所な項は，(前の時刻 t' に)光子を放出し(後の時刻 t に)それを再吸収することによる正味の効果を表している．

この状況では次のように予想することができるだろう．全系は一定の速度と一定の運動量を持って運動し，有効ハミルトニアン

$$H = \frac{\boldsymbol{p}^2}{2m}\,, \qquad \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{p} = 0 \tag{12.5.2}$$

で非相対論的に記述され，したがって($\boldsymbol{r} \equiv \boldsymbol{r}(t=0)$)

$$\boldsymbol{v} = \frac{\boldsymbol{p}}{m}\,, \qquad \boldsymbol{r}(t) = \boldsymbol{r} + \frac{\boldsymbol{p}}{m}t = \boldsymbol{r} + \boldsymbol{v}t \tag{12.5.3}$$

となる．**演算子積**

$$\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{v}t)}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{v}t')}\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{e}^*_{\boldsymbol{k}\lambda} \tag{12.5.4}$$

については，たとえば $\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}$ と $\boldsymbol{k}$ は直交する($\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}=0$，式(12.4.2)参照)から，$\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}$ と $\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{v}t)}$ は交換する．ところで，様々な証明方法によって公式

$$\mathrm{e}^A\,\mathrm{e}^B = \mathrm{e}^{A+B+\frac{1}{2}[A,B]+\cdots} \tag{12.5.5}$$

が成り立つことをすでに知っているが(問題 2-10b を思い出そう)，特に $[A,B]$ が A および B と交換するならば，この級数は有限項で終結する．今扱っている例では

$$A = \mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{v}t)\,, \qquad B = -\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{v}t')\,,$$

$$[A,B] = \underbrace{\left[\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}, \boldsymbol{k}\cdot\frac{\boldsymbol{p}}{m}t'\right]}_{=\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{k}^2}{m}t'} + \underbrace{\left[\boldsymbol{k}\cdot\frac{\boldsymbol{p}}{m}t, \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}\right]}_{=-\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{k}^2}{m}t} = -\mathrm{i}\hbar\frac{\boldsymbol{k}^2}{m}(t-t') \tag{12.5.6}$$

となり，この場合に当たる．したがって

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{v}t)}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{v}t')} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}(t-t')}\,\mathrm{e}^{-i\hbar\frac{\boldsymbol{k}^2}{2m}(t-t')} = \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}(t-t')}\,\mathrm{e}^{-i\frac{\hbar\omega^2}{2mc^2}(t-t')} \tag{12.5.7}$$

となるから，時間積分

$$\int_2^1 \mathrm{d}t\,\mathrm{d}t'\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}[\omega-\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}+\hbar\omega^2/(2mc^2)](t-t')}\mathrm{i}\eta(t-t') \tag{12.5.8}$$

を考えなくてはならない．もし光子のエネルギーが粒子の非相対論的エネルギー程度であり，

$$\hbar\omega \ll mc^2 \tag{12.5.9}$$

となる場合に関心を限定するならば，指数の中の初めの 2 項と第 3 項との比は

$$\frac{\hbar\omega}{2mc^2} \ll 1 \tag{12.5.10}$$

となるから，(相対論的取り扱いができ得ることに気付いてはいるが，とりあえず)第 3 項を無視しよう．第 2 項に関しては

$$|\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}| \le \frac{\omega}{c}|\boldsymbol{v}| = \omega\frac{|\boldsymbol{v}|}{c} \tag{12.5.11}$$

となり，非相対論的運動では $|\boldsymbol{v}| \ll c$ であるから ω に比べて無視する．

したがって，式(12.5.8)の被積分関数中にある指数は実質的に $-\mathrm{i}\omega(t-t')$ に等しくなり，積分を実行すると

$$\begin{aligned}\int_2^1 \mathrm{d}t\,\mathrm{d}t'\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')}\mathrm{i}\eta(t-t') &= \int_{t_2}^{t_1}\mathrm{d}t\int_{t_2}^{t}\mathrm{d}t'\,\mathrm{i}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')}\\ &= \int_{t_2}^{t_1}\mathrm{d}t\,\frac{1}{\omega}\left(1-\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t_2)}\right)\\ &= \int_{t_2}^{t_1}\frac{\mathrm{d}t}{\omega} - \frac{\mathrm{i}}{\omega^2}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t_1-t_2)}-1\right)\end{aligned} \tag{12.5.12}$$

が最終的に残った．まず，時間間隔 $T = t_1 - t_2$ に比例して増大する永年項(右辺の第 1 項目)に注目しよう．この項の W_{12} への寄与は

$$\int \mathrm{d}t\,e^2\sum_\lambda\int\frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k})}{(2\pi)^2\omega^2}\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}\,\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{e}^*_{\boldsymbol{k}\lambda} \tag{12.5.13}$$

である．$\boldsymbol{k}$ にあらわに依存する項はないから，3 個の直交方向のうち 2 方向の偏光和をとることを考慮して方向について平均すると

$$\sum_\lambda \boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}\,\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{e}^*_{\boldsymbol{k}\lambda} \to \frac{2}{3}\boldsymbol{v}^2 \tag{12.5.14}$$

となり，さらに実効的に

$$(\mathrm{d}\boldsymbol{k}) \to 4\pi k^2\mathrm{d}k = 4\pi\frac{\omega^2}{c^2}\mathrm{d}k \tag{12.5.15}$$

としてよい．以上より，作用項に

$$\int_2^1 \mathrm{d}t\,e^2\frac{2}{3}\boldsymbol{v}^2\frac{1}{\pi c^2}\mathrm{d}k = \int_2^1\mathrm{d}t\,\frac{1}{2}\delta m\,\boldsymbol{v}^2 \tag{12.5.16}$$

が加わる．ここで積分が線形に発散することを止めるために積分の上限を導入すると，

$$\delta m = \frac{4}{3\pi}\frac{e^2}{c^2}\int_0^{2\pi/\lambda_{\min}}\mathrm{d}k = \frac{8}{3}\frac{e^2/\lambda_{\min}}{c^2} \tag{12.5.17}$$

となり，この上限を非相対論的状況に制限すると

$$\text{もし}\quad \lambda_{\min} \gg \frac{e^2}{mc^2} \quad \text{ならば}\quad \delta m \ll m \tag{12.5.18}$$

となる(この積分は，ワイスコップ*とファーリー†が気付いたように，ω を $\omega+\hbar k^2/(2m)$ で置き換えて相対論的にすると対数的に発散するだけである)．この項は直接に $\int_2^1 \mathrm{d}t\,\frac{1}{2}m_0\boldsymbol{v}^2$ に加算され，質量 m_0 が実効的に「繰り込まれた質量」

$$m = m_0 + \delta m \tag{12.5.19}$$

に変わることを意味している．

12.6　赤外光子

この節では式(12.5.12)の永年的ではない過渡的な項に注意を向ける．これは式(12.5.13)で

$$\int_2^1 \mathrm{d}t\,[\cdots] \to [\cdots]\left(-\frac{\mathrm{i}}{\omega}\right)\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega T}-1\right) \tag{12.6.1}$$

と置き換えて得られ，さらに式(12.5.14)および(12.5.15)を用いると

$$\begin{aligned} W_{12,\text{n-sec}} &= \int \mathrm{d}k\,\frac{2}{3}\frac{e^2}{\pi c^2}\boldsymbol{v}^2\left(-\frac{\mathrm{i}}{kc}\right)\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega T}-1\right) \\ &= -\mathrm{i}\frac{2}{3}\frac{e^2\boldsymbol{v}^2}{\pi c^3}\int_0^{\omega_{\max}}\frac{\mathrm{d}\omega}{\omega}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega T}-1\right) \end{aligned} \tag{12.6.2}$$

と表されることがわかる．決まった運動量(速度)を持った状態では，これは作用に数値的な項を加えることになり，その結果，時間変換関数に乗法因子

$$\begin{aligned} \mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}W_{12,\text{n-sec}}} &= \mathrm{e}^{\frac{2}{3}\frac{e^2\boldsymbol{v}^2}{\pi\hbar c^3}\int\frac{\mathrm{d}\omega}{\omega}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega T}-1\right)} \\ &= \mathrm{e}^{-\frac{2}{3}\frac{e^2\boldsymbol{v}^2}{\pi\hbar c^3}\int\frac{\mathrm{d}\omega}{\omega}}\left[1+\frac{2}{3}\frac{e^2\boldsymbol{v}^2}{\pi\hbar c^3}\int\frac{\mathrm{d}\omega}{\omega}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega T}+\cdots\right] \end{aligned} \tag{12.6.3}$$

の変化を生じる．指数因子 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega T}$，$\mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega+\omega')T}$，... は1つまたはそれ以上の光子が存在することを示していることは明らかである．いったい何が起こっているのであろうか？

初期の選択 $y''_\alpha = 0$ は「初期場をゼロに設定する」ことに対応し，一定速度で運動している電荷に付随した磁場の存在を否定している．実際上，時刻 t_2 で $\boldsymbol{v}=0$ と設定している．すると，あたかも速度 $\boldsymbol{v}$ が瞬間的に生じたかのように時刻 t_2+0 で磁場が

*Victor Frederick WEISSKOPF (1908–2002)　†Wendell Hinkle FURRY (1907–1984)

突如として生じる．よく知っているように，これが放射を生じる．確かに長い波長の「赤外」光子に関しては，$\mathrm{d}\omega$ の範囲に光子を放出する相対確率は，上で見たように

$$\frac{2}{3\pi}\frac{e^2}{\hbar c}\frac{\boldsymbol{v}^2}{c^2}\frac{\mathrm{d}\omega}{\omega} \tag{12.6.4}$$

であることを知っている．実際

$$\mathrm{e}^{-\frac{2}{3\pi}\frac{e^2\boldsymbol{v}^2}{\hbar c^3}}\,, \quad \mathrm{e}^{-\frac{2}{3\pi}\frac{e^2\boldsymbol{v}^2}{\hbar c^3}}\frac{2}{3\pi}\frac{e^2\boldsymbol{v}^2}{\hbar c^3}\,, \quad \ldots \tag{12.6.5}$$

は 0 光子，1 光子，... を放出する絶対的確率である．このことは，これらの確率を足しあげると

$$\lim_{T\to 0}\mathrm{e}^{\frac{2}{3}\frac{e^2\boldsymbol{v}^2}{\pi\hbar c^3}\int\frac{\mathrm{d}\omega}{\omega}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega T}-1\right)} = 1 \tag{12.6.6}$$

となることから明らかである．これらの因子がなぜ確率振幅ではなく確率そのものであるのか疑問に思うかもしれない．それはこの因子が(時刻 t_2 で)放出する確率振幅と，(時刻 t_1 で)吸収する確率振幅の複素共役をともに含んでいるからである．振幅の絶対値の 2 乗は確率である．

この説明を甘んじて受け入れることもできるが，しかし最初から磁場をあらわに取り扱う方がもっと物理的だろう．その目的のために，ラグランジアン(12.1.24)とその相互作用部分 $L_{\text{int.}}$ (12.1.29)，および y_α の運動方程式(12.1.30)に戻ることにする．もし電流成分 j_α が時間に依存しないならば，y_α に対する定常状態の解は

$$y_\alpha \to \frac{1}{\omega_\alpha}\sqrt{\frac{2\pi}{\hbar\omega_\alpha}}j_\alpha \tag{12.6.7}$$

で与えられる．したがって，もっと一般的に $y_\alpha, y_\alpha^\dagger$ を再定義して

$$\begin{aligned} y_\alpha(t) &\to y_\alpha(t) + \frac{1}{\omega_\alpha}\sqrt{\frac{2\pi}{\hbar\omega_\alpha}}j_\alpha(t)\,, \\ y_\alpha(t)^\dagger &\to y_\alpha(t)^\dagger + \frac{1}{\omega_\alpha}\sqrt{\frac{2\pi}{\hbar\omega_\alpha}}j_\alpha(t)^\dagger \end{aligned} \tag{12.6.8}$$

であるとする．すると，たとえば

$$\begin{aligned} -\sum_\alpha \hbar\omega_\alpha y_\alpha^\dagger y_\alpha \to & -\sum_\alpha \hbar\omega_\alpha y_\alpha^\dagger y_\alpha - \sum_\alpha y_\alpha^\dagger\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_\alpha}}j_\alpha \\ & -\sum_\alpha\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_\alpha}}j_\alpha^\dagger y_\alpha - \sum_\alpha\frac{2\pi}{\omega_\alpha^2}j_\alpha^\dagger j_\alpha \end{aligned} \tag{12.6.9}$$

となり，$L_{\text{int.}}$ は

$$\sum_\alpha\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_\alpha}}\left(j_\alpha^\dagger y_\alpha + y_\alpha^\dagger j_\alpha\right) + 2\sum_\alpha\frac{2\pi}{\omega_\alpha^2}j_\alpha^\dagger j_\alpha \tag{12.6.10}$$

となるから，これら 2 つの項の和はちょうど

$$-\sum_{\alpha}\hbar\omega_{\alpha}y_{\alpha}^{\dagger}y_{\alpha}+\sum_{\alpha}\frac{2\pi}{\omega_{\alpha}^{2}}j_{\alpha}^{\dagger}j_{\alpha} \tag{12.6.11}$$

となる．これでは光子と電荷の間に相互作用が無いように見えるが，それは次の項

$$\sum_{\alpha}\mathrm{i}\hbar y_{\alpha}^{\dagger}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}y_{\alpha}\to\sum_{\alpha}\mathrm{i}\hbar y_{\alpha}^{\dagger}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}y_{\alpha}+\sum_{\alpha}\frac{\mathrm{i}}{\omega_{\alpha}}\sqrt{\frac{2\pi}{\hbar\omega_{\alpha}}}j_{\alpha}^{\dagger}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}y_{\alpha}$$
$$+\sum_{\alpha}\frac{\mathrm{i}}{\omega_{\alpha}}\sqrt{\frac{2\pi}{\hbar\omega_{\alpha}}}y_{\alpha}^{\dagger}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}j_{\alpha}+\sum_{\alpha}\frac{\mathrm{i}\,2\pi}{\omega_{\alpha}^{3}}j_{\alpha}^{\dagger}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}j_{\alpha} \tag{12.6.12}$$

の中にある．このように，今や新しい相互作用ラグランジアン $L_{\mathrm{int.}}$(時間微分を $j^{\dagger}$ に移して)

$$L_{\mathrm{int.}}\to\sum_{\alpha}\frac{1}{\omega_{\alpha}}\sqrt{\frac{2\pi}{\hbar\omega_{\alpha}}}\mathrm{i}\left(y_{\alpha}^{\dagger}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}j_{\alpha}-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}j_{\alpha}^{\dagger}\,y_{\alpha}\right) \tag{12.6.13}$$

と新しい粒子ラグランジアン $L_{\mathrm{part.}}$

$$L_{\mathrm{part.}}\to\sum_{a}\left[\boldsymbol{p}\cdot\left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t}-\boldsymbol{v}\right)-\frac{1}{2}m_{0}\boldsymbol{v}^{2}\right]_{a}-\frac{1}{2}\sum_{a\neq b}\frac{e_{a}e_{b}}{|\boldsymbol{r}_{a}-\boldsymbol{r}_{b}|}+\sum_{\alpha}\frac{2\pi}{\omega_{\alpha}^{2}}j_{\alpha}^{\dagger}j_{\alpha} \tag{12.6.14}$$

を得る．ここでは当面の間は興味のない項として，式(12.6.12)中の最後の和で $\mathrm{i}(j^{\dagger}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}j-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}j^{\dagger}\,j)$ の項を含む粒子の寄与は除いている．この項については後に 437 ページで考えることにする．

1 個の粒子に対しては，付加された粒子項とは何だろうか？ それは式(12.4.11)の 1 粒子版で，各粒子に対して質量繰り込み(12.5.19)を

$$\int\frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k})}{(2\pi)^{3}}\frac{2\pi}{\omega^{2}}e^{2}\sum_{\lambda}\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}\cdot\boldsymbol{v}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}^{*}\cdot\boldsymbol{v}$$
$$=\int\frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k})}{(2\pi)^{2}}\frac{e^{2}}{k^{2}c^{2}}\frac{2}{3}\boldsymbol{v}^{2}=\frac{2}{3\pi}\frac{e^{2}}{c^{2}}\int_{0}^{2\pi/\lambda_{\min}}\mathrm{d}k\;\boldsymbol{v}^{2}=\frac{1}{2}\delta m\,\boldsymbol{v}^{2} \tag{12.6.15}$$

のように作り出す．

異なる粒子間の相互作用はどうだろうか？ それは次の式に含まれている．

$$\int\frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k})}{(2\pi)^{3}}\frac{2\pi}{\omega^{2}}\sum_{\lambda}\sum_{a,b}e_{a}\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}\cdot\boldsymbol{v}_{a}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_{a}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_{b}}e_{b}\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}^{*}\cdot\boldsymbol{v}_{b}$$
$$\to\sum_{a\neq b}e_{a}e_{b}\int\frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k})}{(2\pi)^{2}k^{2}c^{2}}\boldsymbol{v}_{a}\cdot\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}^{*}\cdot\boldsymbol{v}_{b}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}_{a}-\boldsymbol{r}_{b})}\,. \tag{12.6.16}$$

ここで $\mathbf{1}$ が単位ダイアディック(ギブス積)を表すとして，ダイアディックの和

$$\sum_{\lambda=1,2}\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}^{*}=\mathbf{1}-\frac{\boldsymbol{k}\,\boldsymbol{k}}{k^{2}} \tag{12.6.17}$$

は，$\boldsymbol{k}$ に垂直な平面への射影を表すという幾何学的事実を述べている．このことはもちろんすでに式(12.5.14)で利用されている．したがって式(12.6.16)は

$$\frac{1}{2}\sum_{a\neq b}\frac{e_a e_b}{c^2}\frac{1}{2\pi^2}\int\frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k})}{k^2}\left[\boldsymbol{v}_a\cdot\boldsymbol{v}_b+\frac{1}{k^2}\boldsymbol{v}_a\cdot\boldsymbol{\nabla}\,\boldsymbol{v}_b\cdot\boldsymbol{\nabla}\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\bigg|_{\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_a-\boldsymbol{r}_b} \tag{12.6.18}$$

となる．ここで必要な積分(この積分は式(11.4.18)で見たように，本質的にクーロンポテンシャルの逆フーリエ変換であることに注意しよう)を実行すると，まず

$$\int\frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k})}{k^2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}=4\pi\int_0^\infty\mathrm{d}k\,\frac{\sin(kr)}{kr}=\frac{2\pi^2}{r} \tag{12.6.19}$$

であり，そして

$$\begin{aligned}\int\frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k})}{(k^2)^2}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}&\to\int\frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k})}{(k^2)^2}\left[\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}-1-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}\right]\\&=4\pi\int_0^\infty\frac{\mathrm{d}k}{k^2}\left[\frac{\sin(kr)}{kr}-1\right]\\&=\frac{4\pi}{r}\int_0^\infty\mathrm{d}k\,\left[\sin(kr)-kr\right]\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k}\left(-\frac{1}{2k^2}\right)\\&=2\pi\int_0^\infty\mathrm{d}k\,\frac{\cos(kr)-1}{k^2}=-\pi^2 r\end{aligned} \tag{12.6.20}$$

となる．上の式の最初の段階では $\boldsymbol{r}$ に独立な項を引き算しているが，この項は最終的に微分するときに消え去るので等価な置き換えである．微分を実行すると

$$\boldsymbol{v}_a\cdot\boldsymbol{\nabla}\,\boldsymbol{v}_b\cdot\boldsymbol{\nabla}\,r=\boldsymbol{v}_a\cdot\boldsymbol{\nabla}\,\frac{\boldsymbol{v}_b\cdot\boldsymbol{r}}{r}=\frac{\boldsymbol{v}_a\cdot\boldsymbol{v}_b}{r}-\frac{\boldsymbol{v}_a\cdot\boldsymbol{r}\,\boldsymbol{v}_b\cdot\boldsymbol{r}}{r^3} \tag{12.6.21}$$

であるから，結局積分は

$$\begin{aligned}&\frac{1}{2\pi^2}\int\frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k})}{k^2}\left[\boldsymbol{v}_a\cdot\boldsymbol{v}_b+\frac{1}{k^2}\boldsymbol{v}_a\cdot\boldsymbol{\nabla}\,\boldsymbol{v}_b\cdot\boldsymbol{\nabla}\right]\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\\&=\frac{\boldsymbol{v}_a\cdot\boldsymbol{v}_b}{r}-\frac{1}{2}\left[\frac{\boldsymbol{v}_a\cdot\boldsymbol{v}_b}{r}-\frac{\boldsymbol{v}_a\cdot\boldsymbol{r}\,\boldsymbol{v}_b\cdot\boldsymbol{r}}{r^3}\right]=\frac{1}{2}\left[\frac{\boldsymbol{v}_a\cdot\boldsymbol{v}_b}{r}+\frac{\boldsymbol{v}_a\cdot\boldsymbol{r}\,\boldsymbol{v}_b\cdot\boldsymbol{r}}{r^3}\right]\end{aligned} \tag{12.6.22}$$

となり，$L_{\mathrm{part.}}$ に対して磁気エネルギー相互作用の寄与

$$\frac{1}{4}\sum_{a\neq b}\frac{e_a e_b}{c^2}\frac{\boldsymbol{v}_a\cdot\boldsymbol{v}_b+\boldsymbol{v}_a\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}\,\boldsymbol{v}_b\cdot\frac{\boldsymbol{r}}{r}}{r}\bigg|_{\boldsymbol{r}=\boldsymbol{r}_a-\boldsymbol{r}_b} \tag{12.6.23}$$

を与える．これはダーウィン*項として知られている．

12.7 有効ハミルトニアン

相互作用ラグランジアン $L_{\mathrm{int.}}$ (12.6.13)の新しい形は，古い式(12.1.29)に置き換え

*Charles Galton DARWIN (1887–1962)

$$j_\alpha \to \frac{\mathrm{i}}{\omega_\alpha}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}j_\alpha\,, \qquad j_\alpha^\dagger \to -\frac{\mathrm{i}}{\omega_\alpha}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}j_\alpha^\dagger \tag{12.7.1}$$

を実行して得られる．これは $\boldsymbol{A}'$ 項に対して本質的な変化をもたらさない．なぜならば，たとえば次の 2 つの項

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_\alpha t} j_\alpha \quad と \quad \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_\alpha t}\frac{\mathrm{i}}{\omega_\alpha}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}j_\alpha \tag{12.7.2}$$

は時間微分のみ違うからである．しかし，有効作用 (12.2.12) の時間についての非局所な相互作用項においては重要な変化を起こし，この置き換えは次の結果を与える．

$$\begin{aligned}
W_{12,\text{n-loc}} &= \int_2^1 \mathrm{d}t\,\mathrm{d}t'\,\mathrm{i}\sum_\alpha \frac{2\pi}{\omega_\alpha^3}\frac{\mathrm{d}j_\alpha(t)}{\mathrm{d}t}^\dagger \eta(t-t')\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha(t-t')}\frac{\mathrm{d}j_\alpha(t')}{\mathrm{d}t'} \\
&= \int_2^1 \mathrm{d}t\,\mathrm{d}t' \sum_\lambda \int \frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k})}{(2\pi)^3}\frac{2\pi}{\omega^3}\left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\sum_a e_a \boldsymbol{v}_a(t)\cdot \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_a(t)}\right] \\
&\qquad \times \mathrm{i}\eta(t-t')\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')} \\
&\qquad \times \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t'}\sum_b e_b \boldsymbol{v}_b(t')\cdot \boldsymbol{e}^*_{\boldsymbol{k}\lambda}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}_b(t')}\right].
\end{aligned} \tag{12.7.3}$$

ここで，以下のことに注意しよう．たとえば，式

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{v}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} + \boldsymbol{v}\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \tag{12.7.4}$$

においては，第 2 項の大きさは第 1 項に比べて大きさの比が

$$\frac{|\boldsymbol{v}|\frac{\omega}{c}|\boldsymbol{v}|}{\left|\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}\right|} = \frac{|\boldsymbol{v}|}{c}\frac{\omega|\boldsymbol{v}|}{\left|\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}\right|} \cong \frac{|\boldsymbol{v}|}{c} \ll 1 \tag{12.7.5}$$

のオーダーとなる．なぜなら ω の重要な値は $\left|\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}\right|/|\boldsymbol{v}|$ のオーダーの大きさであることが期待されるからである．

これからの議論を簡単化するために，系は水素様原子であるとしよう．すると実効的に 1 個の電荷のみが運動していることになり，粒子作用に追加された時間について非局所的な項は

$$\begin{aligned}
W_{12,\text{n-loc}} = \int_2^1 \mathrm{d}t\,\mathrm{d}t'\,e^2 \sum_\lambda \int \frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k})}{(2\pi)^2\omega^3}\,\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}(t)}{\mathrm{d}t}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}(t)} \\
\times\, \mathrm{i}\eta(t-t')\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega(t-t')}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}(t')}{\mathrm{d}t'}\cdot\boldsymbol{e}^*_{\boldsymbol{k}\lambda}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}(t')}
\end{aligned} \tag{12.7.6}$$

となる．これからつじつまのあった方法で有効ハミルトニアン H を求めよう．まず最初に

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}(t')}{\mathrm{d}t'}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}(t')} = \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H(t-t')}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}(t)}{\mathrm{d}t}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}(t)}\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}H(t-t')} \tag{12.7.7}$$

と書き表す．系は初期に H の固有状態で固有エネルギーが E_0 であると仮定する．右

辺で $H \to E_0$ とすることで，t' の積分で本質的な項は

$$\int_{t_2}^{t} \mathrm{d}t'\, \mathrm{i}\, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\hbar\omega + H - E_0)(t-t')} = \int_0^{t-t_2} \mathrm{d}\tau\, \mathrm{i}\, \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\hbar\omega + H - E_0)\tau}$$

$$= \frac{\hbar}{\hbar\omega + H - E_0}\left[1 - \mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(\hbar\omega + H - E_0)(t-t_2)}\right] \quad (12.7.8)$$

となり，$x = \omega + (H - E_0)/\hbar$，および $\tau = t - t_2$ とすると，上の式は形式上

$$\frac{1}{x} - \frac{1}{x}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}x\tau} \quad (12.7.9)$$

と表され，さらに $x = 0$ では $\mathrm{i}\tau$ に等しい．

ここで，τ の大きさは全測定時間 $T = t_1 - t_2$ のオーダーであり，原子のスケールでは非常に長い時間であることを認識しておく必要がある．エネルギーの測定や遷移過程の詳細に興味のある場合は特にそうである．この場合には，急速に振動する x の関数 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}x\tau}$ は $x = 0$ の近傍以外では，一般に x の積分に寄与しないと考えることができる．そこで式(12.7.9)を実部と虚部に分けると

$$\frac{1 - \cos(x\tau)}{x} + \mathrm{i}\frac{\sin(x\tau)}{x} \quad (12.7.10)$$

であり，虚部の積分を行うと

$$\int_{-x_0}^{x_0} \mathrm{d}x\, \frac{\sin(x\tau)}{x} \cong \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y\, \frac{\sin y}{y} = \pi \quad \text{ただし} \quad x_0\tau \gg 1 \quad (12.7.11)$$

であるから

$$\frac{\sin(x\tau)}{x} \to \pi\delta(x) \quad (12.7.12)$$

となる．一方，$[1 - \cos(x\tau)]/x$ は $x = 0$ で 0 となるので，$x = 0$ での特異性が取り去られた $1/x$ に等しく，主値($\mathcal{P}$)で表される．以上をまとめると，実効的に

$$\frac{1 - \mathrm{e}^{-\mathrm{i}x\tau}}{x} \to \mathcal{P}\frac{1}{x} + \mathrm{i}\pi\delta(x) \quad (12.7.13)$$

となる．

結局ただ 1 つの時間積分が残ったので，ハミルトニアンに付加項

$$\delta H = -e^2 \sum_{\lambda} \int \frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k})}{(2\pi)^2} \frac{\hbar}{\omega^3} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda} \cdot \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}$$
$$\times\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\left[\mathcal{P}\frac{1}{\hbar\omega + H - E_0} + \pi\mathrm{i}\delta(\hbar\omega + H - E_0)\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$$
$$\times\, \boldsymbol{e}^*_{\boldsymbol{k}\lambda} \cdot \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} \quad (12.7.14)$$

が加わったとして作用の変化 δW_{12} を表すことができる．ところで $\boldsymbol{p}$ と $\boldsymbol{r}$ の任意の関数に対して等式

$$\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} f(\boldsymbol{p}, \boldsymbol{r})\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} = f(\boldsymbol{p} - \hbar\boldsymbol{k}, \boldsymbol{r}) \quad (12.7.15)$$

が成り立つ．電子の運動量 $\boldsymbol{p}$ を光子の運動量 $\hbar\boldsymbol{k}$ の分だけ変化させることは，目下考慮中の非相対論的領域で意味のあることだろうか？ 実はそうではない．なぜならば重要な光子のエネルギー $\hbar\omega$ は原子のエネルギーのオーダーであり，ゆえに $|\hbar\boldsymbol{k}| = \hbar\omega/c$ は $|\boldsymbol{p}| \sim$ (原子のエネルギー)$/v$ に比べて非常に小さいからである．したがって式(12.7.14)での指数因子は無視することができるから，偏光和は再び実行可能で

$$\sum_{\lambda=1,2} \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}\cdot \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}\big[\ldots\big]\boldsymbol{e}^*_{\boldsymbol{k}\lambda}\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} \to \frac{2}{3}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}\cdot\big[\ldots\big]\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} \tag{12.7.16}$$

となり，結局

$$\delta H = -\frac{2}{3\pi}\frac{e^2\hbar}{c^3}\int\frac{\mathrm{d}\omega}{\omega}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}\cdot\left[\mathcal{P}\frac{1}{\hbar\omega+H-E_0}+\pi\mathrm{i}\delta(\hbar\omega+H-E_0)\right]\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} \tag{12.7.17}$$

に到達する．

しかし $W_{12,\text{n-loc}}$ から H に付加した項で話は終わらず，433 ページで保留していた項を加えなければならない．この項はエネルギーへ次の寄与を与える．

$$\begin{aligned}
-\sum_\alpha \frac{\pi}{\omega_\alpha^3}&\left(\mathrm{i}j_\alpha^\dagger\frac{\mathrm{d}j_\alpha}{\mathrm{d}t}-\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}j_\alpha^\dagger}{\mathrm{d}t}j_\alpha\right)\\
&= -\pi\sum_\lambda\int\frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k})}{(2\pi)^3}\frac{e^2}{\omega^3}\mathrm{i}\Big[\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\boldsymbol{e}^*_{\boldsymbol{k}\lambda}\cdot\boldsymbol{v}\right)\\
&\qquad\qquad -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda}\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\right)\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}\boldsymbol{e}^*_{\boldsymbol{k}\lambda}\cdot\boldsymbol{v}\Big]\\
&\to -\frac{1}{3\pi}\frac{e^2}{c^3}\int\frac{\mathrm{d}\omega}{\omega}\mathrm{i}\left(\boldsymbol{v}\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}-\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}\cdot\boldsymbol{v}\right)
\end{aligned} \tag{12.7.18}$$

ここで途中の計算は式(12.7.3)と，式(12.7.6)および(12.7.16)の間の計算と類似している．

これら個々の結果を集めると，有効ハミルトニアンの 1 次補正

$$\delta H_1 - \mathrm{i}\delta H_2 \tag{12.7.19}$$

はエルミート演算子ではなく，虚部(歪エルミート部分)

$$\delta H_2 = \frac{2}{3}\frac{e^2\hbar}{c^3}\int\frac{\mathrm{d}\omega}{\omega}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}\cdot\delta(\hbar\omega+H-E_0)\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t} \tag{12.7.20}$$

を持っていることがわかる．もちろん実部(エルミート部分)

$$\begin{aligned}
\delta H_1 = -\frac{2}{3\pi}\frac{e^2}{c^3}\int\frac{\mathrm{d}\omega}{\omega}&\left[\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}\cdot\left(\mathcal{P}\frac{\hbar}{\hbar\omega+H-E_0}\right)\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}\right.\\
&\left.+\frac{1}{2}\mathrm{i}\left(\boldsymbol{v}\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}-\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}\cdot\boldsymbol{v}\right)\right]
\end{aligned} \tag{12.7.21}$$

も持っている．

12.8 エネルギーシフト

まず最初に，実部により誘起されたエネルギー変化 $\langle E_0|\delta H_1|E_0\rangle$ を調べることにしよう．簡単化するために運動方程式

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\big[\boldsymbol{v},H\big]=\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\big[\boldsymbol{v},\hbar\omega+H-E_0\big]\equiv\frac{1}{\mathrm{i}}\big[\boldsymbol{v},\Omega\big]=\mathrm{i}\big[\Omega,\boldsymbol{v}\big] \tag{12.8.1}$$

を用いて，被積分関数を(主値をとる了解のもとに)以下のように書き変える．

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}\cdot\frac{1}{\Omega}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}+\frac{1}{2}\mathrm{i}\Big(\boldsymbol{v}\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}-\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}\cdot\boldsymbol{v}\Big)&=\big(\boldsymbol{v}\Omega-\Omega\boldsymbol{v}\big)\cdot\Omega^{-1}\big(\Omega\boldsymbol{v}-\boldsymbol{v}\Omega\big)\\&\quad+\tfrac{1}{2}\boldsymbol{v}\cdot\big(\boldsymbol{v}\Omega-\Omega\boldsymbol{v}\big)+\tfrac{1}{2}\big(\Omega\boldsymbol{v}-\boldsymbol{v}\Omega\big)\cdot\boldsymbol{v}\\&=\underset{\substack{\downarrow\\ \omega}}{\Omega}\ \boldsymbol{v}\cdot\Omega^{-1}\boldsymbol{v}\ \underset{\substack{\downarrow\\ \omega}}{\Omega}\ -\tfrac{1}{2}\boldsymbol{v}^2\ \underset{\substack{\downarrow\\ \omega}}{\Omega}\ -\tfrac{1}{2}\ \underset{\substack{\downarrow\\ \omega}}{\Omega}\ \boldsymbol{v}^2\,.\end{aligned} \tag{12.8.2}$$

ここで示しているように，左端と右端の Ω はそれぞれ $\langle E_0|$ および $|E_0\rangle$ に隣接するから，固有値 ω で置き換えることができる．したがって

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}\cdot\frac{1}{\Omega}\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}+\frac{1}{2}\mathrm{i}\Big(\boldsymbol{v}\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}-\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}\cdot\boldsymbol{v}\Big)\to\omega^2\boldsymbol{v}\cdot\Big(\frac{1}{\Omega}-\frac{1}{\omega}\Big)\boldsymbol{v} \tag{12.8.3}$$

となり，$\boldsymbol{p}=m_{\mathrm{el}}\boldsymbol{v}$ を用いて

$$\begin{aligned}\delta H_1&=-\frac{2}{3\pi}\frac{e^2}{c^3}\int\mathrm{d}\omega\,\omega\,\boldsymbol{v}\cdot\Big(\mathcal{P}\frac{\hbar}{\hbar\omega+H-E_0}-\mathcal{P}\frac{1}{\omega}\Big)\boldsymbol{v}\\&=-\frac{2}{3\pi}\frac{e^2\hbar}{m_{\mathrm{el}}^2c^3}\int\mathrm{d}\omega\,\omega\,\boldsymbol{p}\cdot\Big(\mathcal{P}\frac{1}{\hbar\omega+H-E_0}-\mathcal{P}\frac{1}{\hbar\omega}\Big)\boldsymbol{p}\end{aligned} \tag{12.8.4}$$

と表される．

引き算項があるために δH_1 は $\boldsymbol{v}^2$ に比例する項を含まない．確かに式(12.6.15)で見たように，質量繰り込みはすでに式(12.6.14)で現れた余分の項で考慮されているから，含むべきではない．したがって，式(12.8.4)に現れる質量は電子の物理的な質量であると考えることができる．

$\langle E_0|\cdots|E_0\rangle$ で期待値をとることを考慮して，主値をとることを了解すると次の 2 つの表現

$$\begin{aligned}\delta H_1&=-\frac{2}{3\pi}\frac{e^2\hbar}{m_{\mathrm{el}}^2c^3}\int\mathrm{d}\omega\,\omega\left[\boldsymbol{p},\frac{1}{H+\hbar\omega-E_0}\right]\cdot\boldsymbol{p}\\&=-\frac{2}{3\pi}\frac{e^2\hbar}{m_{\mathrm{el}}^2c^3}\int\mathrm{d}\omega\,\omega\,\boldsymbol{p}\cdot\left[\frac{1}{H+\hbar\omega-E_0},\boldsymbol{p}\right]\end{aligned} \tag{12.8.5}$$

はともに正しいから，これらの和の半分に等しいことに注意しよう．ところで，任意の演算子 A に対して

$$[\boldsymbol{p}, A^{-1}] = -A^{-1}[\boldsymbol{p}, A]A^{-1} \tag{12.8.6}$$

が成り立ち，さらに $H = \boldsymbol{p}^2/(2m_{\mathrm{el}}) + V(\boldsymbol{r})$ に対しては

$$[\boldsymbol{p}, H] = \frac{\hbar}{\mathrm{i}}\boldsymbol{\nabla}V \tag{12.8.7}$$

となる．それゆえに

$$\left[\boldsymbol{p}, \frac{1}{H+\hbar\omega-E_0}\right]\cdot\boldsymbol{p} \to -\frac{1}{\hbar\omega}\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\boldsymbol{\nabla}V\frac{1}{H+\hbar\omega-E_0}\cdot\boldsymbol{p} \tag{12.8.8}$$

および，このエルミート共役

$$\boldsymbol{p}\cdot\left[\frac{1}{H+\hbar\omega-E_0}, \boldsymbol{p}\right] \to -\boldsymbol{p}\cdot\frac{1}{H+\hbar\omega-E_0}\left(-\frac{\hbar}{\mathrm{i}}\right)\boldsymbol{\nabla}V\frac{1}{\hbar\omega} \tag{12.8.9}$$

が成り立つ．したがって，これらの和の半分をとると

$$\begin{aligned}\delta H_1 &\to -\frac{e^2\hbar}{3\pi m_{\mathrm{el}}^2c^3}\int_0^{\omega_{\max}}\mathrm{d}\omega\,\mathrm{i}\Big[\boldsymbol{\nabla}V\cdot\frac{1}{H+\hbar\omega-E_0}\boldsymbol{p} \\ &\qquad\qquad -\boldsymbol{p}\cdot\frac{1}{H+\hbar\omega-E_0}\boldsymbol{\nabla}V\Big] \\ &= -\frac{e^2}{3\pi m_{\mathrm{el}}^2c^3}\,\mathrm{i}\left[\boldsymbol{\nabla}V\cdot\log\left(\frac{\hbar\omega_{\max}}{|H-E_0|}\right)\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}\cdot\log\left(\frac{\hbar\omega_{\max}}{|H-E_0|}\right)\boldsymbol{\nabla}V\right]\end{aligned} \tag{12.8.10}$$

となる．ここで非相対論的積分を電子の質量 m_{el} に付随した相対論的エネルギー $m_{\mathrm{el}}c^2$ と同じオーダーの（この非相対論的近似は当然破綻する）エネルギー $\hbar\omega_{\max}$ で止めている．

対数的演算子 $\log(\hbar\omega_{\max}/|H-E_0|)$ をある実効的な数値 $\log(m_{\mathrm{el}}c^2/\Delta E)$ で置き換えることができると仮定しよう．すると，

$$\delta H_1 \to \frac{e^2}{3\pi m_{\mathrm{el}}^2c^3}\log\left(\frac{m_{\mathrm{el}}c^2}{\Delta E}\right)(-\mathrm{i})\underbrace{\left(\boldsymbol{\nabla}V\cdot\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}\cdot\boldsymbol{\nabla}V\right)}_{=\mathrm{i}\hbar\boldsymbol{\nabla}^2V} \tag{12.8.11}$$

となり，ここで

$$\boldsymbol{\nabla}^2V = \boldsymbol{\nabla}^2\frac{-Ze^2}{r} = 4\pi Ze^2\delta(\boldsymbol{r}) \tag{12.8.12}$$

を用いると，

$$\begin{aligned}\delta H_1 &\to \frac{e^2\hbar}{3\pi m_{\mathrm{el}}^2c^3}\log\left(\frac{m_{\mathrm{el}}c^2}{\Delta E}\right)4\pi Ze^2\delta(\boldsymbol{r}) \\ &= \frac{4}{3}\frac{e^2}{\hbar c}\left(\frac{\hbar}{m_{\mathrm{el}}c}\right)^2 Ze^2\log\left(\frac{m_{\mathrm{el}}c^2}{\Delta E}\right)\delta(\boldsymbol{r})\end{aligned} \tag{12.8.13}$$

となり，したがってエネルギーシフト

$$\langle E_0|\delta H|E_0\rangle = \frac{4}{3}\frac{e^2}{\hbar c}\left(\frac{\hbar}{m_{\mathrm{el}}c}\right)^2 Ze^2\log\left(\frac{m_{\mathrm{el}}c^2}{\Delta E}\right)|\psi_{E_0}(0)|^2 \tag{12.8.14}$$

を得る．これは $\boldsymbol{r}=0$ すなわち原子核の位置での波動関数 $\psi_{E_0}(\boldsymbol{r})$ の値を含んでいる．

軌道角運動量が $l=0$ で主量子数が n に対しては，式(8.3.30)および $|Y_{00}|^2=(4\pi)^{-1}$ より

$$|\psi_{E_0}(0)|^2=\frac{1}{\pi}\left(\frac{Z}{na_0}\right)^3 \tag{12.8.15}$$

である．さらに電子のコンプトン*波長 $\hbar/(m_{\mathrm{el}}c)$ とボーア半径 $a_0=\hbar^2/(m_{\mathrm{el}}e^2)$ の比がゾンマーフェルトの微細構造定数 α で

$$\frac{\hbar}{m_{\mathrm{el}}c}\Big/a_0=\alpha=\frac{1}{137.036} \tag{12.8.16}$$

であるから，ベーテ†の結果

$$\delta E_{n,0}=\langle n,0|\delta H_1|n,0\rangle=\frac{4}{3\pi}\frac{\alpha^3Z^4}{n^3}\log\left(\frac{m_{\mathrm{el}}c^2}{\Delta E}\right)\frac{e^2}{a_0} \tag{12.8.17}$$

を得る．$l=0$ の状態に対するこの上向きの変位はラム‡シフトとして知られている．大きさが α^2 のオーダーの相対論的効果と合わせると，水素様原子の微細構造を完全に説明できる．

12.9　遷移率

式(12.7.21)の実部 δH_1 を扱ったので，次に式(12.7.20)の虚部 δH_2 に取り組むことにしよう．この項の意味が何であるかを調べるために，確率振幅 $\langle E_0,t_1|E_0,t_2\rangle$ に注目しよう．「エネルギーシフト」$-\mathrm{i}\langle\delta H_2\rangle$ は時間因子 $\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}ET}$ に対して，実数因子

$$\mathrm{e}^{-\frac{1}{\hbar}\langle\delta H_2\rangle T} \tag{12.9.1}$$

の寄与をする．このことは，時間 $T=t_1-t_2$ の経過後に最初の状態が持続している確率が

$$\mathrm{e}^{-\frac{2}{\hbar}\langle\delta H_2\rangle T}=\mathrm{e}^{-\gamma T} \tag{12.9.2}$$

であり，γ は系が最初の状態から抜け出る単位時間当たりの確率であることを意味している．言い換えると，γ は自発放出による不安定な系の崩壊定数である．

このようにして

$$\gamma=\frac{2}{\hbar}\langle E_0|\delta H_1|E_0\rangle=\frac{4}{3}\frac{e^2}{c^3}\langle E_0|\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}\cdot\int_0^\infty\frac{\mathrm{d}\omega}{\omega}\,\delta(\hbar\omega+H-E_0)\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}|E_0\rangle \tag{12.9.3}$$

を得る．ここで積分は

---

*Arthur Holly COMPTON (1982–1962)　†Hans Albrecht BETHE (b. 1906)　‡Willis Eugene LAMB (b. 1913)

$$\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}\omega}{\omega}\,\delta(\hbar\omega + H - E_0) = \frac{1}{E_0 - H}\eta(E_0 - H)$$
$$= \sum_{E(<E_0)} |E,\ldots\rangle \frac{1}{E_0 - E}\langle E,\ldots| \tag{12.9.4}$$

であり，省略記号はエネルギー縮退の場合に必要な量子数を示している．したがって

$$\gamma = \frac{4}{3}\frac{e^2}{c^3}\sum_{E(<E_0)}\frac{1}{E_0 - E}\left|\langle E,\ldots|\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}|E_0\rangle\right|^2 \tag{12.9.5}$$

となり，E_0 より下のすべての状態について和をとる．別の表現は

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\boldsymbol{v} = \frac{1}{\mathrm{i}\hbar}[\boldsymbol{v}, H] = \left(\frac{1}{\mathrm{i}\hbar}\right)^2\Big[[\boldsymbol{r}, H], H\Big] \tag{12.9.6}$$

および，$\boldsymbol{v} = \boldsymbol{p}/m_{\mathrm{el}}$ から得ることができ，以下のように表される．

$$\begin{aligned}\gamma &= \frac{4}{3}\frac{e^2}{\hbar c}\sum_{E(<E_0)}\frac{E_0 - E}{\hbar}\left|\langle E,\ldots|\frac{\boldsymbol{v}}{c}|E_0\rangle\right|^2 \\ &= \frac{4}{3}\frac{e^2}{\hbar c}\sum_{E(<E_0)}\frac{E_0 - E}{\hbar}\left|\langle E,\ldots|\frac{\boldsymbol{p}}{m_{\mathrm{el}}c}|E_0\rangle\right|^2 \\ &= \frac{4}{3}\left(\frac{e^2}{\hbar c}\right)^3\sum_{E(<E_0)}\frac{E_0 - E}{\hbar}\left(\frac{E_0 - E}{e^2/a_0}\right)^2\left|\langle E,\ldots|\frac{\boldsymbol{r}}{a_0}|E_0\rangle\right|^2 .\end{aligned} \tag{12.9.7}$$

γ を評価するに当たって，$\boldsymbol{r}$ または $\boldsymbol{p}$ の遷移行列要素を同じように用いることができることをこの式は示している．

明らかに式(12.9.5)の個々の項は，(角)振動数

$$\omega = \frac{1}{\hbar}(E_0 - E) \tag{12.9.8}$$

の光子の放出による遷移率を表している．これは**エネルギー**の放射率に対する古典的なラーマー*の公式

$$\frac{2}{3}\frac{e^2}{c^3}\left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}\right)^2 = P \tag{12.9.9}$$

に量子論的に対応する式である．実際，量子論的なエネルギー放射率は，各遷移率に対応するエネルギー $\hbar\omega = E_0 - E$ を掛けて得られ

$$P = \sum_{E(<E_0)}\frac{4}{3}\frac{e^2}{c^3}\left|\langle E,\ldots|\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}|E_0\rangle\right|^2 \tag{12.9.10}$$

となる．十分高い励起状態に対しては，低いエネルギー状態への行列要素の和は高いエネルギー状態への和と等しくなるから，置き換え

$$\sum_{E(<E_0)} \to \frac{1}{2}\sum_{\text{すべての }E} \tag{12.9.11}$$

*Sir Joseph Larmor (1857–1942)

が許され，したがって

$$P \to \frac{2}{3}\frac{e^2}{c^3}\langle E_0|\left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}\right)^2|E_0\rangle = \frac{2}{3}\frac{e^2}{c^3}\left\langle\left(\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}}{\mathrm{d}t}\right)^2\right\rangle_{E_0} \tag{12.9.12}$$

となる．このように古典的なラーマーの公式を再現したことは，どのように古典物理学が量子力学に極限として含まれているかを例示している．

遷移率を直接的に導出することについてはどうであろうか？ 式(12.2.14)

$$\langle y^{\dagger\prime},\ldots,t_1|y',\ldots,t_2\rangle = \langle y^{\dagger\prime},t_1|y',t_2\rangle\langle\ldots,t_1|\ldots,t_2\rangle^{\boldsymbol{A}'} \tag{12.9.13}$$

に戻ることにしよう．初期には光子は存在せず最後に光子が1個存在する確率振幅を求めたいならば，たった1つの $y_\alpha^{\dagger\prime} = \langle y^{\dagger\prime}|1_\alpha\rangle$ を含む項を見出さなければならない．$\langle y^{\dagger\prime},t_1|0,t_2\rangle = 1$ であるから，それは $\langle\ldots|\ldots\rangle^{\boldsymbol{A}'}$ の項だけからもたらされる．したがって

$$\frac{\partial}{\partial y_\alpha^{\dagger\prime}}\langle\ldots,t_1|\ldots,t_2\rangle^{\boldsymbol{A}'}\Big|_{y^{\dagger\prime}=0} = \frac{\mathrm{i}}{\hbar}\langle\ldots,t_1|\frac{\partial}{\partial y_\alpha^{\dagger\prime}}W_{12}^{\boldsymbol{A}'}|\ldots,t_2\rangle^{\boldsymbol{A}'=0} \tag{12.9.14}$$

を必要とする．ここで簡単のために1つの粒子のみを考えると(式(12.3.1)を参照せよ)

$$\frac{\partial}{\partial y_\alpha^{\dagger\prime}}W_{12}^{\boldsymbol{A}'} = \int_2^1 \mathrm{d}t\, e\boldsymbol{v}(t)\cdot\sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_\alpha}}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha(t_1-t)}\boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r})^* \tag{12.9.15}$$

であり，いわゆる双極子近似

$$\boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r})^* = \sqrt{\frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k})}{(2\pi)^3}}\,\boldsymbol{e}_\alpha\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}} \cong \sqrt{\frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k})}{(2\pi)^3}}\,\boldsymbol{e}_\alpha \tag{12.9.16}$$

が適用できる．なぜならば，典型的な光子の波長 $\lambda = |\boldsymbol{k}|^{-1}$ は原子内部の距離 r よりもはるかに大きく，したがって $|\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}| \le r/\lambda \ll 1$ が成り立つからである．それゆえ遷移 $E_0 \to E,\ldots$ の確率は

$$\frac{1}{\hbar^2}\frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k})}{(2\pi)^3}\frac{2\pi\hbar}{\omega}e^2\left|\int_2^1 \mathrm{d}t\,\langle E,\ldots|\boldsymbol{e}_\alpha\cdot\boldsymbol{v}(t)|E_0\rangle\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\right|^2 \tag{12.9.17}$$

である．ここで

$$\begin{aligned}\langle E,\ldots|\boldsymbol{v}(t)|E_0\rangle &= \langle E,\ldots|\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Ht}\boldsymbol{v}\,\mathrm{e}^{-\frac{\mathrm{i}}{\hbar}Ht}|E_0\rangle \\ &= \langle E,\ldots|\boldsymbol{v}|E_0\rangle\,\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E-E_0)t}\end{aligned} \tag{12.9.18}$$

であるから，

$$\left|\int_2^1 \mathrm{d}t\;\mathrm{e}^{\frac{\mathrm{i}}{\hbar}(E-E_0+\hbar\omega)t}\right|^2 = T\,2\pi\hbar\,\delta(E-E_0+\hbar\omega) \tag{12.9.19}$$

と表すことができる(問題 9-9d を参照)．これは時間間隔 $T = t_1 - t_2$ に比例するか

ら，単位時間当たりの確率は

$$\frac{1}{\hbar^2}\frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k})}{(2\pi)^3}\frac{2\pi\hbar}{\omega}\,e^2\,2\pi\hbar\,\delta(E-E_0+\hbar\omega)\big|\big\langle E\big|\boldsymbol{e}_\alpha\cdot\boldsymbol{v}\big|E_0\big\rangle\big|^2 \tag{12.9.20}$$

となる．2 つの分極の和をとり $\boldsymbol{k}$ について積分すると，$E_0 \to E$ に対する遷移率

$$\gamma_{E\leftarrow E_0} = \int \frac{4\pi\omega\mathrm{d}\omega}{2\pi c^3}\,\delta(\hbar\omega+E-E_0)\,e^2\,\frac{2}{3}\big|\big\langle E,\ldots\big|\boldsymbol{v}\big|E_0\big\rangle\big|^2 \tag{12.9.21}$$

を得る．これらの部分率の和は全遷移率 γ (12.9.7) となり，γ を計算する 2 つの方法に矛盾がないことを示している．

もし初期にこの種類の光子が n 個あったとして，さらに 1 個の光子が加わる確率を問題とするならば，$\langle y^{\dagger\prime}|n\rangle$ に掛ける付加的な $y^{\dagger\prime}$ 因子が $\sqrt{n+1}\langle y^{\dagger\prime}|n+1\rangle$ を与え，したがって(単位時間当たりの)確率は因子 $n+1$ を持ち

$$(n+1)\gamma_{E\leftarrow E_0} = n\gamma_{E\leftarrow E_0} + \gamma_{E\leftarrow E_0} \tag{12.9.22}$$

となる．すなわち，自発放出(率 $\gamma_{E\leftarrow E_0}$)に加えて，すでに存在する n 個の光子に誘導された誘導放出(率 $n\gamma_{E\leftarrow E_0}$)がある．また吸収に対する同様な議論から，関与する光子の数 n に比例する吸収率が得られる．

12.10 トムソン散乱

最後の応用として，初めに 1 つの光子(波数ベクトル $\boldsymbol{k}'$, 偏極 λ')が存在し，終わりに別の光子($\boldsymbol{k}$, λ)が残り，そして初めと終わりで 1 個の電荷(電子)が静止している($\boldsymbol{p}=0$)とする．すなわち，静止している電荷による光子の散乱を考えよう．確率振幅

$$\psi_{\text{scatt.}} = \big\langle 1_{\boldsymbol{k}\lambda},\boldsymbol{p}=0,t_1\big|1_{\boldsymbol{k}'\lambda'},\boldsymbol{p}=0,t_2\big\rangle \tag{12.10.1}$$

を取り出すために，時間変換関数を 2 回微分すると

$$\psi_{\text{scatt.}} = \frac{\partial}{\partial y_\alpha^{\dagger\prime}}\frac{\partial}{\partial y_\beta''}\big\langle y^{\dagger\prime},\boldsymbol{p}=0,t_1\big|y'',\boldsymbol{p}=0,t_2\big\rangle\Big|_{y^{\dagger\prime}=0,\ y''=0}$$

$$\text{ただし}\quad \alpha\equiv\boldsymbol{k}\lambda\,,\ \beta\equiv\boldsymbol{k}'\lambda'\,,\ \alpha\neq\beta \tag{12.10.2}$$

となる．すると確率振幅は

$$\psi_{\text{scatt.}} = \big\langle 0,\boldsymbol{p}=0,t_1\big|\Psi\big|0,\boldsymbol{p}=0,t_2\big\rangle \tag{12.10.3}$$

と表され，ここで現れた演算子 Ψ は

$$\Psi = \left(y_\alpha(t_1)y_\beta(t_2)^\dagger + \frac{\partial y_\beta(t_2)^\dagger}{\partial y_\alpha^{\dagger\prime}}\right)\Bigg|_{y^{\dagger\prime}=0,\ y''=0} \tag{12.10.4}$$

であり，微分の順序を変えると等価な表現

$$\Psi = \left(y_\alpha(t_1) y_\beta(t_2)^\dagger + \frac{\partial y_\alpha(t_1)}{\partial y''_\beta} \right) \Bigg|_{y^{\dagger\prime} = 0,\ y'' = 0} \tag{12.10.5}$$

を得る．

ここで考慮中の長波長極限では双極子近似（12.9.16)が適用できる．すると(再び $T = t_1 - t_2$ として)

$$\begin{aligned} y_\alpha(t_1) &= y_\alpha(t_2)\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha T} + \mathrm{i}\sqrt{\frac{2\pi}{\hbar\omega_\alpha}} \int_2^1 \mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega_\alpha(t_1 - t)} e\boldsymbol{v}(t) \cdot \boldsymbol{A}_\alpha\big(\boldsymbol{r}(t)\big)^* \\ &\to y''_\alpha\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha T} + \mathrm{i}\sqrt{\frac{2\pi}{\hbar\omega_\alpha}} \sqrt{\frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k}_\alpha)}{(2\pi)^3}} \int_2^1 \mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha(t_1 - t)} e\boldsymbol{v}(t) \cdot \boldsymbol{e}^*_\alpha \end{aligned} \tag{12.10.6}$$

となり，

$$\begin{aligned} m_{\mathrm{el}}\boldsymbol{v} = \boldsymbol{p} - \frac{e}{c}\boldsymbol{A}' \to -e\sum_{\alpha'} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_{\alpha'}}} \sqrt{\frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k}_{\alpha'})}{(2\pi)^3}} \Big[&\boldsymbol{e}_{\alpha'}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{\alpha'}(t - t_2)} y''_{\alpha'} \\ &+ y^{\dagger\prime}_{\alpha'}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{\alpha'}(t_1 - t)} \boldsymbol{e}^*_{\alpha'} \Big] \end{aligned} \tag{12.10.7}$$

を用いると，

$$\begin{aligned} y_\alpha(t_1) \to 0\,, \qquad \frac{\partial y_\alpha(t_1)}{\partial y''_\beta} &\to \mathrm{i}\sqrt{\frac{2\pi}{\hbar\omega_\alpha}} \sqrt{\frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k}_\alpha)}{(2\pi)^3}} \sqrt{\frac{2\pi\hbar}{\omega_\beta}} \sqrt{\frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k}_\beta)}{(2\pi)^3}} \left(-\frac{e^2}{m_{\mathrm{el}}} \right) \\ &\times \int_2^1 \mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\alpha(t_1 - t)}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_\beta(t - t_2)} \boldsymbol{e}^*_\alpha \cdot \boldsymbol{e}_\beta \end{aligned} \tag{12.10.8}$$

を得る．したがって遷移確率は

$$\begin{aligned} |\psi_{\mathrm{scatt.}}|^2 = \left(\frac{e^2}{m_{\mathrm{el}}}\right)^2 \frac{2\pi}{\omega_\alpha} \frac{2\pi}{\omega_\beta} \frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k}_\alpha)}{(2\pi)^3} \frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k}_\beta)}{(2\pi)^3} \left(\boldsymbol{e}^*_\alpha \cdot \boldsymbol{e}_\beta\right)^2 \\ \times \underbrace{\left| \int_2^1 \mathrm{d}t\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}(\omega_\alpha - \omega_\beta)t} \right|^2}_{= 2\pi T \delta(\omega_\alpha - \omega_\beta)} \end{aligned} \tag{12.10.9}$$

であり，遷移率は

$$\frac{1}{T}|\psi_{\mathrm{scatt.}}|^2 = \left(\frac{e^2}{m_{\mathrm{el}}}\right)^2 \frac{1}{(2\pi)^3} \delta(\omega - \omega') \frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k})}{\omega} \frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k}')}{\omega'} \left(\boldsymbol{e}^*_\lambda \cdot \boldsymbol{e}_{\lambda'}\right)^2 \tag{12.10.10}$$

となる．ここで $\boldsymbol{k}_\alpha, \omega_\alpha \equiv \boldsymbol{k}, \omega$ および $\boldsymbol{k}_\beta, \omega_\beta \equiv \boldsymbol{k}', \omega'$ と記している．δ 関数は散乱が弾性的であり，散乱された光子は入射光子と同じ振動数を持っているという期待された結果をこの式は示している．

立体角 $\mathrm{d}\Omega$ への散乱を表す微分散乱断面積 $\mathrm{d}\sigma$ に興味があるから，

$$(\mathrm{d}\boldsymbol{k}) = \frac{\omega^2 \mathrm{d}\omega}{c^3}\,\mathrm{d}\Omega \tag{12.10.11}$$

とおいて，散乱光子の振動数 ω について積分し入射流束 $c(\mathrm{d}\boldsymbol{k}')/(2\pi)^3$ で割ると

$$\mathrm{d}\sigma=\left(\frac{e^2}{m_{\mathrm{el}}c^2}\right)^2(\boldsymbol{e}_\lambda^*\cdot\boldsymbol{e}_{\lambda'})^2\,\mathrm{d}\Omega \tag{12.10.12}$$

を得る．もし入射光子の偏極状態を知らないならば，2 つの λ' の可能性を平均しなければならないから

$$(\boldsymbol{e}_\lambda^*\cdot\boldsymbol{e}_{\lambda'})^2\to\frac{1}{2}\sum_{\lambda'=1,2}(\boldsymbol{e}_\lambda^*\cdot\boldsymbol{e}_{\lambda'})^2=\frac{1}{2}-\frac{1}{2}\frac{\boldsymbol{k}'\cdot\boldsymbol{e}_\lambda\,\boldsymbol{e}_\lambda^*\cdot\boldsymbol{k}'}{k'^2} \tag{12.10.13}$$

となる．さらに，もし散乱された光子の 2 つの偏極を区別しないならば，2 つの可能な λ の値について和をとらなければならないから

$$(\boldsymbol{e}_\lambda^*\cdot\boldsymbol{e}_{\lambda'})^2\to\sum_{\lambda=1,2}(\boldsymbol{e}_\lambda^*\cdot\boldsymbol{e}_{\lambda'})^2=1-\frac{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{e}_{\lambda'}\,\boldsymbol{e}_{\lambda'}^*\cdot\boldsymbol{k}}{k^2} \tag{12.10.14}$$

となる．これらを集めると，θ を散乱角として $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{k}'=kk'\cos\theta$ を用いて

$$(\boldsymbol{e}_\lambda^*\cdot\boldsymbol{e}_{\lambda'})^2\to\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\frac{(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{k}')^2}{k^2\,k'^2}=\frac{1}{2}+\frac{1}{2}\cos^2\theta \tag{12.10.15}$$

となる．以上より，式(12.10.12)から偏極に影響を受けない微分断面積

$$\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=\frac{1}{2}\left(\frac{e^2}{m_{\mathrm{el}}c^2}\right)^2\left(1+\cos^2\theta\right) \tag{12.10.16}$$

を得る．

全散乱断面積は

$$\sigma=\int\mathrm{d}\Omega\,\frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\Omega}=\frac{1}{2}\left(\frac{e^2}{m_{\mathrm{el}}c^2}\right)^2 4\pi\left(1+\frac{1}{3}\right)=\frac{8\pi}{3}\left(\frac{e^2}{m_{\mathrm{el}}c^2}\right)^2 \tag{12.10.17}$$

で，小さな障害物による光の散乱に対する古典的トムソン*断面積と一致する．前に述べたラーマーの公式に関してなされた注意はこの場合にも当てはまる．すなわち，古典物理は 1 つの極限として量子力学に含まれる．

問題

12-1 ラグランジアン(12.1.1)のすべての場の変数に対して運動方程式があるわけではないということは，ゲージ変換に結び付いた不定性，もしくは自由性に由来する．ゲージ変換は，任意の関数 $\lambda(\boldsymbol{r},t)$ を用いて

$$\boldsymbol{A}\to\boldsymbol{A}+\boldsymbol{\nabla}\lambda\,,\quad \Phi\to\Phi-\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\lambda\,,$$

$$\boldsymbol{E}\to\boldsymbol{E}\,,\quad \boldsymbol{B}\to\boldsymbol{B}$$

*Sir John Joseph THOMSON (1856–1940)

と変換することである．無限小ゲージ変換は

$$\delta_\lambda L = \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}) \left[\frac{1}{c}\boldsymbol{j} \cdot \boldsymbol{\nabla}\delta\lambda + \rho\frac{1}{c}\frac{\partial}{\partial t}\delta\lambda\right]$$

を与えることを示せ．次に，停留作用の原理を応用して，連続の方程式

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \boldsymbol{j} + \frac{\partial}{\partial t}\rho = 0$$

を導け．これがなぜ電荷の局所的保存を意味するかを説明せよ．

12-2　ベクトル場 $\boldsymbol{F}(\boldsymbol{r})$ の縦成分と横成分は，ベクトルの恒等式を用いて

$$\boldsymbol{F}_{\|}(\boldsymbol{r}) = \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}') \frac{1}{4\pi|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\left[-\boldsymbol{\nabla}'\boldsymbol{\nabla}' \cdot \boldsymbol{F}(\boldsymbol{r}')\right],$$

$$\boldsymbol{F}_{\perp}(\boldsymbol{r}) = \int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}') \frac{1}{4\pi|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}\boldsymbol{\nabla}' \times \left[\boldsymbol{\nabla}' \times \boldsymbol{F}(\boldsymbol{r}')\right]$$

と表されることを示せ．

12-3　式(12.1.18)の横モード関数 $\boldsymbol{A}_\alpha$ の完全性は，横波のデルタ関数 $\delta_\perp(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ を用いて

$$\sum_\alpha \boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r})\,\boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r}')^* = \delta_\perp(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$$

と表される．このデルタ関数は性質

$$\boldsymbol{\nabla} \cdot \delta_\perp(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = 0\,, \qquad \boldsymbol{\nabla}' \cdot \delta_\perp(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = 0$$

を持ち，任意の $\boldsymbol{F} = \boldsymbol{F}_\| + \boldsymbol{F}_\perp$ に対して等式

$$\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r}')\,\delta_\perp(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') \cdot \boldsymbol{F}(\boldsymbol{r}') = \boldsymbol{F}_\perp(\boldsymbol{r})$$

を満たすダイアディックである．$\mathbf{1}$ を単位ダイアディックとして，表式

$$\int \frac{(\mathrm{d}\boldsymbol{k})}{(2\pi)^3}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\boldsymbol{k}\cdot(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\left(\mathbf{1} - \frac{\boldsymbol{k}\,\boldsymbol{k}}{k^2}\right)$$

はこれらの性質を持っていることを示せ．

12-4　モード展開(12.1.21)はモード関数 $\boldsymbol{A}_\alpha$ と非エルミート変数 $y_\alpha, y_\alpha^\dagger$ を用いて，$\boldsymbol{A}$ と $\boldsymbol{E}_\perp$ を構築する．これを逆にして $y_\alpha, y_\alpha^\dagger$ を $\boldsymbol{A}$ と $\boldsymbol{E}_\perp$ を用いて表せ．

12-5　式(12.1.22)と(12.1.23)が正しいことを示せ．

12-6a　正規直交横モード関数 $\boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r})$ の組が与えられたとすると，次の式

$$\boldsymbol{B}_\alpha(\boldsymbol{r}) = \frac{c}{\omega_\alpha}\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r})$$

によって定義された関数の組は，$\boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r})$ と同様に有効に用いることができるモード関数であることを示せ．$\boldsymbol{B}_\alpha(\boldsymbol{r})$ によって $\boldsymbol{A}_\alpha(\boldsymbol{r})$ を表すことができるか？

12-6b まず

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t) = \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t) = \sum_\alpha \sqrt{2\pi\hbar\omega_\alpha}\left(y_\alpha(t)\boldsymbol{B}_\alpha(\boldsymbol{r}) + y_\alpha(t)^\dagger \boldsymbol{B}_\alpha(\boldsymbol{r})^*\right)$$

であることを認めると，放射エネルギー密度演算子は

$$\begin{aligned} U = \frac{1}{8\pi}\left(\boldsymbol{E}_\perp^2 + \boldsymbol{B}^2\right) = \frac{\hbar}{2}\sum_{\alpha,\beta}\sqrt{\omega_\alpha\omega_\beta}\Big[&\left(\boldsymbol{A}_\alpha^* \cdot \boldsymbol{A}_\beta + \boldsymbol{B}_\alpha^* \cdot \boldsymbol{B}_\beta\right) y_\alpha^\dagger y_\beta \\ &- \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{A}_\alpha \cdot \boldsymbol{A}_\beta - \boldsymbol{B}_\alpha \cdot \boldsymbol{B}_\beta\right) y_\alpha y_\beta \\ &- \frac{1}{2}\left(\boldsymbol{A}_\alpha^* \cdot \boldsymbol{A}_\beta^* - \boldsymbol{B}_\alpha^* \cdot \boldsymbol{B}_\beta^*\right) y_\alpha^\dagger y_\beta^\dagger\Big] \end{aligned}$$

となることを証明せよ．ここで，式(12.1.23)の場合に現れたゼロでない真空のエネルギー密度を与える項が省略されている．さらに

$$\int (\mathrm{d}\boldsymbol{r})\, U = \sum_\alpha \hbar\omega_\alpha y_\alpha^\dagger y_\alpha$$

を検証せよ．

12-6c 古典的なポインティング*ベクトルからの類推より，エネルギー流束密度演算子を

$$\boldsymbol{S} = \frac{c}{4\pi}\boldsymbol{E}_\perp \times \boldsymbol{B}$$

とする．この(通常の省略をした)モード展開を与えよ．それを用いて

$$\frac{\partial}{\partial t}U + \boldsymbol{\nabla}\cdot\boldsymbol{S} = -\boldsymbol{j}_\perp \cdot \boldsymbol{E}_\perp$$

を証明せよ．これはポインティングの定理の量子版である．

12-7a 停留作用の原理をラグランジアン(12.1.13)に適用し，基本的な場の交換関係

$$\left[\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t), \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{E}_\perp(\boldsymbol{r}',t)\right]$$

を求めよ．ここで $\boldsymbol{a}$ と $\boldsymbol{b}$ は任意の数ベクトルである．次に $y, y^\dagger$ が通常の交換関係にしたがうならば，モード展開(12.1.21)は矛盾がないことを証明せよ．

12-7b 次の交換関係を計算せよ．

$$\left[\boldsymbol{a}\cdot\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r},t), \boldsymbol{b}\cdot\boldsymbol{E}_\perp(\boldsymbol{r}',t)\right].$$

---

*John Henry POYNTING (1852–1914)

12-8a　式 (12.1.30) の流れの成分 $j_\alpha(t)$ が古典的な電流 $\boldsymbol{j}$ から導かれ，したがってそれらは演算子ではなく数値的量であると仮定する．さらに $t < t_2$ および $t > t_1$ で $\boldsymbol{j} = 0$ と仮定する．このとき真空持続振幅 $\langle 0, t_1 | 0, t_2 \rangle^{\boldsymbol{j}}$ を求めよ．

12-8b　ここでは $\boldsymbol{j} = \boldsymbol{j}_< + \boldsymbol{j}_>$ とし，T を $t_1 > T > t_2$ である時間として，$t > T$ では $\boldsymbol{j}_< = 0$ であり，$t < T$ では $\boldsymbol{j}_> = 0$ であるとする．恒等式

$$\langle 0, t_1 | 0, t_2 \rangle^{\boldsymbol{j}_< + \boldsymbol{j}_>} = \sum_{\{n\}} \langle 0, t_1 | \{n\}, T \rangle^{\boldsymbol{j}_>} \langle \{n\}, T | 0, t_2 \rangle^{\boldsymbol{j}_<}$$

を用いて，$\langle \{n\}, t_1 | 0, t_2 \rangle^{\boldsymbol{j}}$ および $\langle 0, t_1 | \{n\}, t_2 \rangle^{\boldsymbol{j}}$ を求めよ．

12-8c　最初に $\langle y^{\dagger\prime}, t_1 | 0, t_2 \rangle^{\boldsymbol{j}}$ と $\langle 0, t_1 | y'', t_2 \rangle^{\boldsymbol{j}}$ を構築することにより前問とは異なった導出を行い，次に前問の結果と比較せよ．

12-9a　与えられた波数ベクトル $\boldsymbol{k}$ に対して，$\boldsymbol{k} = k\boldsymbol{e}_3$ となる座標系を採用する．すると実単位ベクトル

$$\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}1} = \boldsymbol{e}_1 \mathrel{\widehat{=}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} , \quad \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}2} = \boldsymbol{e}_2 \mathrel{\widehat{=}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

は線形偏光を記述し，そして複素単位ベクトル

$$\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}+} = 2^{-\frac{1}{2}} (\boldsymbol{e}_1 + \mathrm{i}\boldsymbol{e}_2) \mathrel{\widehat{=}} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 1 \\ \mathrm{i} \\ 0 \end{pmatrix} , \quad \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}-} = 2^{-\frac{1}{2}} (\mathrm{i}\boldsymbol{e}_1 + \boldsymbol{e}_2) \mathrel{\widehat{=}} \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} \mathrm{i} \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}$$

は円偏光を記述する（この記述にはヘリシティの方がよい）．次の式が成り立つことを具体的に計算して確かめよ．

$$\sum_{\lambda=1,2} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda} \boldsymbol{e}^*_{\boldsymbol{k}\lambda} = \sum_{\lambda=\pm} \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\lambda} \boldsymbol{e}^*_{\boldsymbol{k}\lambda} = \mathbf{1} - \frac{\boldsymbol{k}\,\boldsymbol{k}}{k^2} \mathrel{\widehat{=}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} .$$

12-9b　次の偏極ベクトルの対

$$\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}a} = \boldsymbol{e}_1 \cos\vartheta + \boldsymbol{e}_2\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\varphi} \sin\vartheta , \quad \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}b} = \boldsymbol{e}_2 \cos\vartheta - \boldsymbol{e}_1\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\varphi} \sin\vartheta$$

に対して前問と同じ計算を繰り返せ．これらはどのように $\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}\pm}$ 対と関係しているか？ $\boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}a}, \boldsymbol{e}_{\boldsymbol{k}b}$ で記述される偏光の種類は何か？

12-10　等方的な 3 次元調和振動子ポテンシャル中の荷電粒子に対して，初期状態が

$|n'_x, n'_y, n'_z\rangle \equiv |2\rangle$ で終状態が $\langle n_x, n_y, n_z| \equiv \langle 1|$ であるとする．遷移確率 $\gamma_{1\leftarrow 2}$ を求めよ．次に初期状態の崩壊率を得るために，すべての可能な遷移について和を計算せよ．

12-11　水素様原子に関して：行列要素

$$\langle n, l, m|\boldsymbol{r}|n', l', m'\rangle$$

について，どの行列要素が自動的にゼロとはならないかを述べる選択則を求めよ（ヒント：$\boldsymbol{r} \to -\boldsymbol{r}$ を考慮せよ）．

12-12a　水素様原子に関して：主量子数が $n = 2$，角運動量が $l = 1$，磁気量子数が $m = 1$ または $m = 0$ または $m = -1$ の状態の崩壊率を求めよ．なぜ 1 つの m の値を考えれば十分か？

12-12b　$n = 3$, $l = 0, 1, 2$ の場合に前問を繰り返せ．

12-12c　任意の n, $l = n - 1$, $m = l$，すなわち問題 9-16 の円リュードベリ状態の場合に前問を繰り返せ．

12-13　トムソン散乱断面積 (12.10.17) は，いわゆる古典電子半径 $e^2/(m_{\mathrm{el}}c^2)$ の 2 乗の定数倍である．この断面積と電子のコンプトン波長とボーア半径との関係は何か？

索　引

■カ行

■タ行

【著者】
J. シュウィンガー（Julian Schwinger）

【編者】
B.-G. エングラート（Berthold-Georg Englert）
Gleissenweg 23
85737 Ismaning
Germany

【訳者】
清水　清孝（しみず　きよたか）
1945 年生.
1968 年東京大学理学部物理学科卒業,
1972 年米国 Stony Brook 大学院修了, Ph.D.,
現在, 上智大学理工学部教授.
専門は理論物理学.
主著:『量子力学 II』(産業図書),『シュレーディンガー方程式の解き方教えます』(共立出版).

日向　裕幸（ひゅうが　ひろゆき）
1946 年生.
1968 年東京大学理学部物理学科卒業,
1972 年米国 Stony Brook 大学院修了, Ph.D.,
現在, 慶應義塾大学理工学部教授.
専門は理論物理学.

シュウィンガー量子力学

平成 24 年 6 月 30 日　発　行

訳　者　清　水　清　孝
　　　　日　向　裕　幸

編　集　シュプリンガー・ジャパン株式会社

発行者　池　田　和　博

発行所　丸善出版株式会社
〒101-0051 東京都千代田区神田神保町二丁目17番
編集：電話 (03) 3512-3263／FAX (03) 3512-3272
営業：電話 (03) 3512-3256／FAX (03) 3512-3270
http://pub.maruzen.co.jp/

プリント オンデマンド　大日本印刷株式会社

ISBN 978-4-621-06420-7　C3042　　Printed in Japan

本書は, 2003年 6 月にシュプリンガー・ジャパン株式会社より
出版された同名書籍を再出版したものです.